

令和2年度博士論文

圧縮性乱流における物質混合過程の解明及び
モデル化に関する研究

指導教員

長田 孝二 教授

森 浩一 准教授

渡邊 智昭 助教

名古屋大学院 工学研究科

航空宇宙工学専攻

タイ 有名

目次

| | | |
|--------------|---|-----------|
| 第 1 章 | 緒論 | 1 |
| 1.1 | はじめに | 1 |
| 1.2 | 物質混合を伴う乱流に対する数値計算手法について | 4 |
| 1.2.1 | Direct Numerical Simulation 法 (DNS 法) | 4 |
| 1.2.2 | Implicit Large Eddy Simulation (陰的 LES 法) | 6 |
| 1.2.3 | 分子混合モデル | 8 |
| 1.3 | 本論文の構成 | 11 |
| 1.4 | 主な記号 | 13 |
| 第 2 章 | 物質混合を伴う圧縮性二次元噴流の直接数値計算 | 15 |
| 2.1 | 緒言 | 15 |
| 2.2 | 圧縮性流体の支配方程式 | 16 |
| 2.3 | 計算対象-時間発展型の二次元噴流 | 18 |
| 2.3.1 | 初期条件 | 18 |
| 2.3.2 | 境界条件 | 24 |
| 2.4 | 計算手法-陽的離散化スキーム | 28 |
| 2.4.1 | 空間微分 | 28 |
| 2.4.2 | 時間積分 | 30 |
| 2.4.3 | フィルタリング | 32 |
| 2.4.4 | 計算手順 | 34 |
| 2.5 | 計算結果 | 36 |
| 2.5.1 | 自己相似領域における特性パラメーターの調査 | 36 |
| 2.5.2 | スカラー場の可視化 | 38 |
| 2.5.3 | 半値幅の時間推移 | 41 |
| 2.5.4 | 噴流広がり方向における平均値及び r.m.s. 値 | 43 |
| 2.5.5 | スカラー散逸率の生成項 | 46 |
| 2.6 | 結言 | 48 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 第3章 | 陰的 LES 法による物質混合を伴う圧縮性二次元噴流の数値計算 | 49 |
| 3.1 | 緒言 | 49 |
| 3.2 | 計算手法 | 50 |
| 3.2.1 | Selective フィルター | 50 |
| 3.2.2 | Shock capturing フィルター | 52 |
| 3.3 | 計算条件の設定 | 54 |
| 3.4 | 計算結果 | 56 |
| 3.4.1 | 乱流への時間発展過程の可視化 | 56 |
| 3.4.2 | 自己相似領域における乱流・パッシブスカラー混合の統計的な特性 | 62 |
| 3.4.3 | 乱流エネルギーおよびスカラバリエーションに対するフィルタリングの寄与 | 68 |
| 3.5 | 結言 | 80 |
| 第4章 | 分子拡散に対する混合体積モデル (MVM) のアプリオリテスト | 81 |
| 4.1 | 緒言 | 81 |
| 4.2 | 混合体積モデル (MVM) | 82 |
| 4.3 | 検証方法 | 85 |
| 4.4 | 検証結果 | 88 |
| 4.5 | 結言 | 100 |
| 第5章 | 結論 | 101 |
| | 謝辞 | 104 |
| | 研究業績 | 105 |
| | 学会誌等 | 105 |
| | 国際会議 | 105 |
| | 参考文献 | 106 |

第1章

緒論

1.1 はじめに

圧縮性乱流中の物質混合現象を数値シミュレーションで予測することは、特に工学分野及び自然科学分野において重要な役割を担っている。例えば工業分野の製品開発では、自動車のガソリンエンジン筒内に流体の膨張・圧縮、物質混合、燃焼の複雑な物理過程が含まれており、小スケールの乱流渦による燃料と空気の混合が燃焼速度を支配する。このように物質混合の燃焼への寄与を高信頼性かつ経済的な数値計算手法で評価することが自動車の燃費性能及び環境性能向上設計を加速することができる^[1]。また、次世代の超音速旅客機のスクラムジェットエンジンの開発の際に縦渦混合による超音速主流中の燃焼促進を解決するには、高マッハ数流れを効率的に再現できる数値計算手法が有力なツールとなり得ることが一般的に認識されている^[2,3]。自然科学における応用は工業分野とは異なり、特に自然災害の1つである火山噴火による火山灰雲の形成・拡散に対する予測は数値計算手法によってのみ可能となる。そのため、乱流雲内の火山灰粒子と大気粒子の混合過程を扱う移流拡散モデル^[4,5]の予測精度の向上は航空機事故の削減や高信頼性の防災情報の提供にとって不可欠だと考えられている。このように圧縮性乱流中の物質混合過程を計算する実用的な数値計算手法を確立するために、流体の圧縮性が乱流中の物質混合に与える影響を解明することが重要となる。

近年の計算機性能の飛躍的な向上とともに、工業規模の反応性流体数値解析手法の高精度化・高効率化が強く求められている。反応性流体の数値計算には主に流体運動に対する計算と反応機構に対する計算からなる。流体運動を計算するための支配方程式には多くの空間微分項が含まれており、適切にスケール情報を計算することが必要とされている。また局所反応速度の計算には一点情報が必要とされている。一般的にスケール情報を計算するための離散化スキームは間隔が一定の格子場との相性がよく、自由移動可能な仮想粒子には一点情報をもつため、格子と仮想粒子の二種類の計算要素を組み合わせた連成計算手法に関する研究は盛んに行われている。近年工業的な応用に向けてよく注目されている連成計算手法は大スケールの非定常乱流計算用のLES法と確率密度関数の輸送方程式を

ラグランジュ的に計算するモンテカルロ法を組み合わせた計算手法で、通称 LES/FDF 法^[6]と呼ばれている。この手法の先行研究では、特に乱流燃焼の高信頼性シミュレーションについて近年多くの研究実績がなされている。例えば、自着火火炎におけるリフトオフ特性の解明^[7]、乱流予混合火炎における消炎・再着火特性の解明^[8]と過渡パルスジェット中の火炎特性の解明^[9]への適用が取り上げられている。LES/FDF 法とは別に、LES-粒子法^[10]と呼ばれる連成計算手法も近年提案されている。確率過程論を導入していないため、LES-粒子法の粒子計算スキームでは LES/FDF 法に組み込まれた乱数生成の計算を省き、数値計算過程の簡便性が進化したことで実用性がより高いと期待されている。しかしながら、LES-粒子法の先行研究では非圧縮性反応流^[10-12]に対する有効性しか確定されていなく、これから LES-粒子法を工業用の反応性流体の数値計算に拡張するために、現段階の基礎検証用の流体をさらに複雑化する必要がある。

そこで、本研究では圧縮性乱流用の LES-粒子法を構成する要素スキームの確立を研究目的としている。流体中の化学反応機構を正確に捉えるために粒子の一点情報を用いて反応速度式をそのまま計算するだけでなく、物理的には分子拡散過程が局所反応速度に大きな影響を与えるので、近隣の仮想粒子間の分子混合効果の予測に対する分子混合モデルは連成計算法において必要不可欠である。また、分子混合モデルへの入力データには粒子の一点情報だけでなく、格子場の離散化手法で計算されたスカラー散逸率のような微小スケールの情報も必要になる。本研究では圧縮性乱流中の物質混合を高精度かつ高効率に予測する LES-粒子法の要素スキームとして、格子を取り扱う Large Eddy Simulation 法 (陰的 LES 法) と仮想粒子を取り扱う分子混合モデルの一種である混合体積モデル (MVM) を圧縮性乱流中のパッシブスカラー混合過程に対してそれぞれ検証した。陰的 LES 法及び混合体積モデルのメリットについては後節に述べられている。具体的な研究内容としてまず、圧縮性乱流場における詳細な物質混合機構の把握および目標値として扱えるデータベースの構築が必要なので、最小の乱流スケールまで正確に計算可能な Direct Numerical Simulation 法 (DNS 法) を利用し、種々の工学的な諸問題点と深い関連を持った基礎流れとして二次元自由噴流を幅広い噴流マッハ数を設定して計算した。本 DNS 法による計算データを統計解析することで、流体の圧縮性が乱流中の物質混合特性に与える影響という今までに研究例が少ないことを明らかにした。DNS 計算結果ベースのアプリオリ (事前検証) テストを実施することで、混合体積モデル (MVM)^[10] の圧縮性乱流における分子混合拡散効果の予測に対する有効性をはじめて確立した。これまでにない強い圧縮性を持つ局所体積膨張領域、局所体積圧縮領域と弱い圧縮性を持つ領域における混合体積モデルの予測性能解析をそれぞれ実施した。さらに DNS の計算結果と Implicit Large Eddy Simulation 法 (陰的 LES 法) の亜音速・超音速二次元噴流に対する計算結果を比較し、これまでにない格子スケール成分のパッシブスカラー散逸率とサブスケール成分のパッシブスカラー散逸率を分けて定量化する統計解析を行い、分子混合モデルに必要な格子場におけるパッ

シブスカラー散逸率の予測に対する陰的 LES 法の有効性を確立した。以下に本研究に関連する研究についてまとめる。

1.2 物質混合を伴う乱流に対する数値計算手法について

1.2.1 Direct Numerical Simulation 法 (DNS 法)

乱流に対する数値計算手法の1つとして、Direct Numerical Simulation 法 (DNS 法) が挙げられる。すべてのスケールの乱流渦の運動を解像するのに十分な格子を設置した上で、乱流運動を記述する支配方程式通りに直接計算するので、LES, RANS のような乱流のモデリング計算手法に対して正確な計算手法と言われており、数多くの先行研究では DNS 法によるデータを基準とされている^[13-15]。しかしながら、高レイノルズ数の DNS 計算では計算格子数は計算領域と乱流の最小スケールであるコルモゴロフスケール η によって決定される。DNS に必要な計算格子数は Reynolds 数 Re の $9/4$ 乗に比例し、最小の乱流特性時間はおおよそ Re の $-3/4$ 乗に比例することから、 Re が 10 倍に上がった乱流の DNS には計算量を最低 1000 倍に増やす必要があると見積もられる。さらに物質混合を伴う乱流では、スカラー変動の最小スケールである Batchelor スケール η_θ がシュミット数 Sc と $\eta_\theta = \eta Sc^{-0.5}$ の関係にある。このように DNS 法を工学・工業分野でよくみられる高レイノルズ数・高シュミット数の大規模流れ予測に適用することは、高計算性能のスーパーコンピュータを利用したとしても不可能である。その代わりに、工学・工業分野によく応用された自由せん断乱流の基礎特性解明及び経済的な計算手法で基礎検証するためのデータベースの構築が DNS 法の主な役割となる。

物質混合を伴う乱流 DNS では、流体のナビエ・ストークス方程式と次式の混合分率の移流拡散方程式を連立させて混合場・乱流場の時間発展を解く。

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \phi u_j}{\partial x_j} = \frac{1}{Sc Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right). \quad (1.1)$$

ここで、 ϕ は混合分率を指すパッシブスカラーである。パッシブスカラーは流れ場に影響しない混合拡散過程を表すスカラーであり、現実の世界では希薄物質の濃度及びその物質間の混合分率に対応する。 t は時間、 x_j は j 方向における位置座標、 ρ は流体密度、 D は物質拡散係数を表す。従来から、物質混合を伴う非圧縮性乱流 DNS に関して多くの研究が行われてきた。一般的にはマッハ数が 0.3 以下で、圧力や温度による流体の密度変化を無視できる流体のみに対して、非圧縮性を仮定した流体数値解析が行われている。例えば、Stanley ら^[16] が初めて DNS 法を空間発展型の平板噴流の数値解析に適用し、パッシブスカラー変動スケールの大きさの違いによる混合特性を解明した。さらに、Wu ら^[17] は初期条件とした平板噴流出口におけるレイノルズ数及び速度分布が平板噴流の速度場・パッシブスカラー場の空間発展に与える影響を DNS で調査した。Bouali ら^[18] は蒸発効果を受ける乱流二相流中の乱流-物質混合の相互作用を DNS で解析した。これまで非圧縮性流体

の数値的な研究で蓄積されてきたノウハウ及び計算機の大容量化・高速化をベースとし、DNS法は圧縮性流体中の物質混合特性の解明にも適用されつつある。Ni^[19]は乱流マッハ数及び外力の圧縮モードの強さが圧縮性ボックス乱流中のパッシブスカラー輸送に及ぼす影響を明らかにした。Danishら^[20]は減衰等方性乱流中のスカラー散逸機構の局所流線形状および速度の発散への依存性を示し、さらにDNS法の解析結果からスカラー勾配と速度勾配テンソルの相互作用を捉えるためのモデルを提案した。Zhangら^[21]はDNS法で時間発展型乱流境界層の外縁にある乱流非乱流界面のパッシブスカラー場を調査した。

1.2.2 Implicit Large Eddy Simulation (陰的 LES 法)

これからの CFD ソフトウェア及び実際の工学設計の底上げに有望な流体数値計算手法として、実用に向けた Large Eddy Simulation 法 (LES 法) の研究が盛んに行われている。LES 法は 1963 年に Smagorinsky によって大気中のガス予測手法として提案された^[22]。乱流に代表される非線形・非定常なマルチスケール現象の予測について、ボックスフィルターや Gaussian フィルターやシャープカットオフフィルターなどの数値フィルターでスケール分離し、マクロスケールの現象を DNS 法のように格子の離散化スキームで直接計算し、マイクロスケールの現象をサブグリッド (SGS) 応力としてモデル化するという基本的なコンセプトに基づいて LES 法が発展してきた。この SGS モデルは LES 法の予測精度に深く関わった数値スキームとなる。物質混合を伴う乱流の LES 予測に対する SGS モデルの有効性を検証した事例として、Wegner らは直交流に流入する噴流の乱流混合について実験結果と比較し、Smagorinsky SGS モデルと Eddy diffusivity モデルを実装した LES 法の有効性を確認した。さらに、LES 法で直交流と噴流の角度が乱流混合特性に対する影響を調査した^[23]。Ribault は圧縮性混合層のスカラー混合について実験値との比較検証から、Dynamic Smagorinsky モデルと Dynamic mixed モデルを実装した LES 法が圧縮性乱流中のスカラー混合への主要効果を捉えることができることを示した^[24]。

また、上述の数値フィルターと SGS モデルを利用した陽的 LES 法のほかに、空間的な離散化スキームに固有な切り捨て誤差を付加することにより物理的な SGS 散逸効果をモデリングした陰的 LES 法の研究も近年広く行われている。支配方程式を解くための高次精度の時間積分・空間微分スキームに陽的ローパスフィルターを実装する計算方法は陰的 LES 法の主な 1 つである。陰的 LES 法では物理的な仮説に基づいた SGS モデルが不要であるため、応用面では陽的 LES 法より計算コストや計算コードの使いやすさにもっと大きな優位性が潜んでいる。計算コストに関して、同一の計算対象に対する Dynamic Smagorinsky モデルを使った陽的 LES 法の計算時間は陰的 LES 法より 40% ~ 50% 増加したということが過去の研究で実証されている^[25]。陽的ローパスフィルターを実装する陰的 LES 法では、一般的に次式のように時間積分スキームに更新された変数 $f(\mathbf{x}, t)$ にフィルタリングをかける。

$$f(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f(\mathbf{x}, t) - \Omega(f(\mathbf{x} + i\Delta\mathbf{x}, t)). \quad (1.2)$$

ここで、 Ω は隣接格子における変数情報を関数とした減衰量であり、この隣接格子位置とフィルターをかける格子位置の距離は倍数 i の格子幅 Δx である。減衰量は陽的ローパスフィルターの数値粘性により調整されるので、格子で解像できない成分の乱れを完全に散逸させ、格子よりはるかに大きな成分の乱れに数値粘性をかけないようになっている。

したがって、陽的ローパスフィルターは陰的 LES 法において計算安定性を保つだけではなく、陰的に SGS 成分の粘性散逸効果の大スケール乱れへの寄与をモデリングする役割も果たしている。これまでに実験結果や DNS 計算結果との比較検証から、陽的ローパスフィルターの数値粘性による SGS モデリングを利用した陰的 LES 法の非圧縮性格子乱流中のスカラー混合層^[26]、非圧縮性平板噴流中の乱流混合^[12,27]及び遷音速円形噴流中の乱流騒音^[28]の数値予測に対する計算有効性が確認されている。

上述の陰的 LES 法で超音速のような高速流れ中の圧縮性乱流を計算する場合、波数空間での切り捨て誤差が第一種不連続となる点付近で生じたギブス振動が格子幅とともに強くなり、噴流がポテンシャルコア領域から自己相似領域まで遷移するところで計算が破綻してしまう。こういったギブス振動による数値発散問題を解決するために、1980年代から TVD スキームや WENO スキームなどの高次精度風上型の離散手法に関する研究が多く行われてきた。それらの計算スキームのまとめについては Shu^[29]と Pirozzoli^[30]を参照されたい。これらの高次精度風上型の離散手法はショックを捉えることができることが強みであるが、ショック乱流干渉の数値計算では過大な数値粘性により乱流変動がスムージングされてしまい、計算精度が低下してしまうことがよくある。圧縮性乱流中のショック構造だけに数値粘性をかけるように、Bogey らは適応空間フィルターと Jameson-like ショックセンサーを組み合わせた新しいショック捕獲スキームを提案した。新しいショック捕獲スキームがこの10年間で多くの超音速噴流の計算安定性に役立ち、特に過膨張噴流中のノイズ生成機構^[31]、音波の非線形伝播プロセス^[32]、平板に衝突した適性膨張円形噴流に生成されたエッジトーン現象^[33]において適切な計算結果が得られた。このようなショック捕獲スキームを使った LES 法の先行研究については、高速乱流噴流中のノイズ特性の予測に対する有効性のみが検証されている。このスキームで高速乱流中の混合特性を予測する際に、物質混合場に不連続構造が現れていないが、速度場による移流効果が含まれるので、物質混合効果の強さを表すパッシブスカラーの計算にもフィルターをかけることが必要とされている。

1.2.3 分子混合モデル

反応性流体用の格子・粒子の連成計算法では，ラグランジュ粒子法で物質混合場をシミュレーションする際に，微視的な分子混合は限られた粒子数で解像不可能な混合現象として扱われている．LES法のSGSモデルと似たように，分子混合モデルにより分子混合によるスカラ変動の変化項を閉じる．分子混合モデルは粒子間の相互作用を利用して分子混合過程をモデリングする．計算スキームの簡潔性及び高計算精度の両立を目指し1960年代から分子混合モデルが次々と提案され，物質混合を含む複雑な流れのシミュレーションに適用されつつある．既存のモデルの中で最もシンプルなのは任意の2つの流体塊が乱流特性によって決まった衝突頻度で融合・再分散を繰り返すと仮定して取り扱うCurlモデル^[34]と多数の流体塊の持つスカラ量が系の平均値に向かって変化すると仮定して取り扱うInteraction by Exchange with the Meanモデル(IEMモデル)^[35]である．この二つのモデルに基づき，さらなる混合特性の予測精度の向上を課題として構築された新しい分子混合モデルが続出している．例えば，修正Curlモデル^[36]では2体衝突スキームに混合を制御する確率変数を導入することで，1度の衝突操作においてスカラ量が急激に変化すること，混合初期において離散的に定まった値を与えることなどのような従来のCurlモデル^[34]で生じた問題を緩和している．また近年の分子混合モデルに関する研究では，混合モデリングを実行する系内の粒子の選定基準について，ただ物理空間で位置の近い粒子を選定するだけでなく，粒子間におけるスカラ量の離れ具合も重要視されるようになってきた．系内の粒子群のスカラ空間における局所性を強化することは，特に燃焼流れをシミュレーションする際に薄い反応帯の周りにおける非物理的な反応機構の抑制に深く関係している．このようにスカラ量の離れ具合で混合粒子を選定する分子混合モデルの代表例として，Euclidean Minimum Spanning Treeモデル(EMSTモデル)^[37]，Shadow-Position Mixingモデル(SPMモデル)^[38]，Multiple Mapping Conditioningモデル(MMCモデル)^[39]が過去の研究で取り上げられている．

近年，LES-粒子法^[10]と呼ばれる確率過程論の導入を必要としない連成計算手法の重要な一環として，IEMモデルに示された分子拡散予測の理論に新たな系を導入する混合体積モデル(MVMモデル)が提案されている^[10]．MVMモデルは次式のように分子拡散項による粒子が持つスカラ量の変化を混合体積のスカラ平均値 $\langle\varphi|V\rangle$ への緩和過程として扱っている．

$$[D_{\Gamma}]^{(n)} = \frac{1}{\tau_M} (\langle\varphi|V\rangle - \varphi^{(n)}). \quad (1.3)$$

従来のIEMタイプのモデルでのレイノルズ平均値もしくは格子平均値とは違い，MVMモデルでは混合体積という新しい発想の仮想局所空間が平均値を取る系になる．混合体積は

一定の粒子数における局所粒子集団により形成されるので、図(1.1)のように混合体積の大きさ及び形状は集団内の粒子の空間分布に依存する。式(1.3)で1つの粒子 n における分子拡散項 $[D_T]^{(n)}$ を予測するにはその粒子が含まれた混合体積のスカラ平均値が必要になる。この平均の取り方についてはLES法に使われたローパスフィルターの機能と似たように、全計算領域内の粒子が持つスカラ量にカーネル関数をかけることにより該当の混合体積内の粒子が持つスカラ量を抽出して平均化処理をする。そのため、混合体積平均をLES法の格子平均と入れ替えたSGSスカラバリエーションの輸送方程式に式(1.3)を代入することにより、混合時間スケール τ_M は混合体積平均をされたスカラバリエーションとスカラ散逸率の比で計算されている。従来のモデルにおけるスカラー場と速度場の時間スケールの比のようなパラメータの手動調整が必要なく、MVMモデルはより簡潔・陽的かつ高精度的に分子拡散項を予測できるモデリング手法となることが期待できる。図(1.1)(a)と(b)の比較から、全計算領域内の粒子数が少なくなると混合体積が大きくなるので、混合時間スケールの混合長さスケールへの依存性から、全計算領域内の粒子数を変えても、混合時間スケール及び長さスケールが自動的に調整される。よって、混合体積内の粒子数を適切に設定しておけば、MVMモデルが全計算領域内の粒子数にロバストな予測結果を提供できると考えられている。しかし、過去の研究例ではMVMモデルが非圧縮性乱流用のLES-粒子法^[10]にしか実装されていないため、現段階では圧縮性乱流における分子拡散過程の予測に対するMVMモデルの有効性は検証されていない。

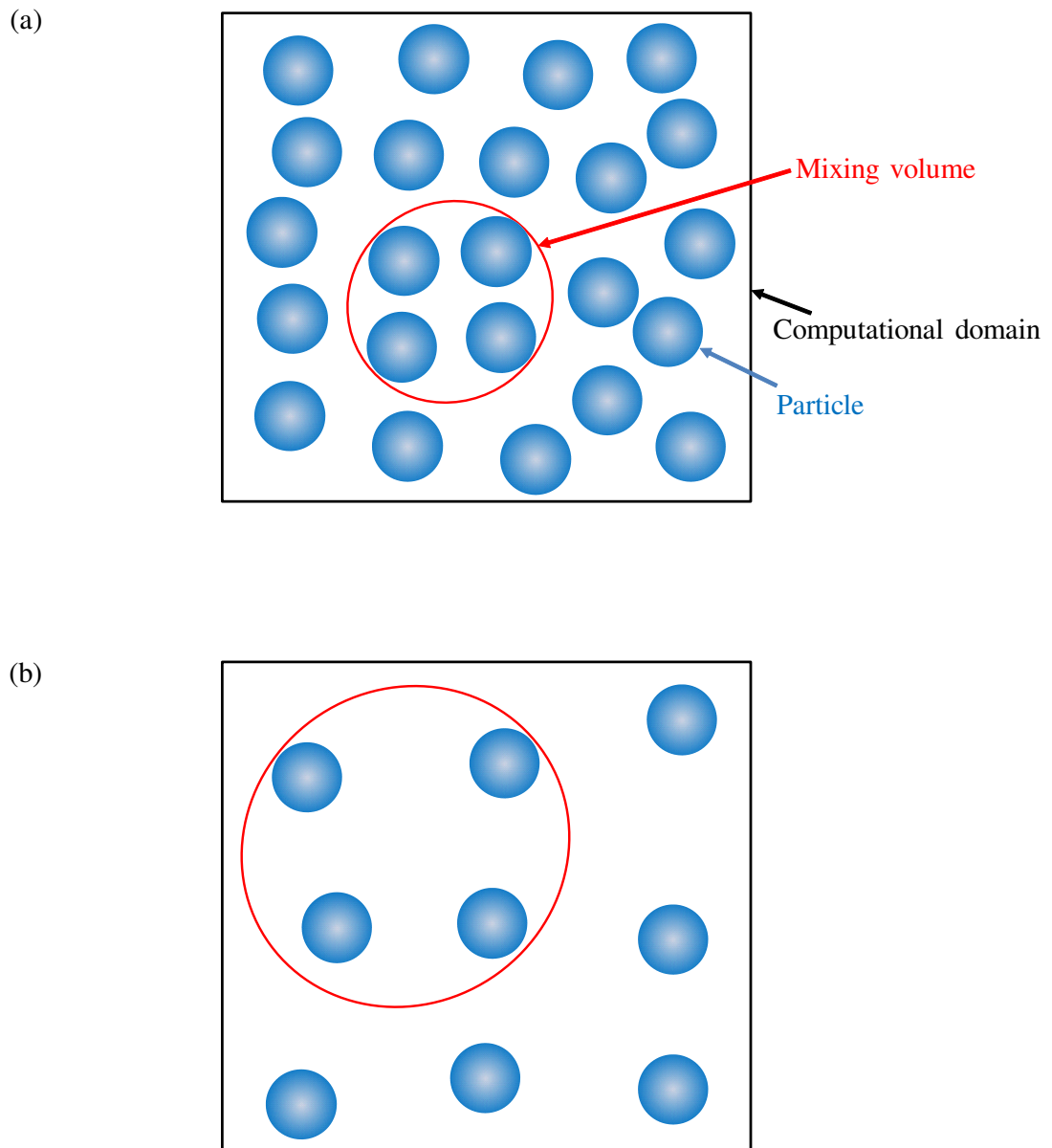


図 1.1 混合体積の概念図：(a) 全計算領域における粒子数が多い場合，(b) 全計算領域における粒子数が少ない場合．

1.3 本論文の構成

以上の節で説明された物質混合を伴う乱流に対する数値計算手法の研究例では陰的 LES 法と混合体積モデルの優れた計算精度及び使いやすさからそれらを組み合わせて新しい連成手法を確立することにより、これからの反応性流体用の連成計算手法の実用化に大きな期待ができる。しかしながら、圧縮性流体中の物質混合に対する陰的 LES 法と混合体積モデルの予測可能性については未だに研究されていない。また、流体の圧縮性による混合機構の影響を解明するには十分なデータが取得されていない。そこで、物質混合を伴う乱流に対する数値計算手法に関する基礎研究として、本研究では上記の二点に関する調査を行った。

(第二章)DNS 法による物質混合を伴う圧縮性時間発展型の二次元噴流の数値計算を実行し、流体の圧縮性が乱流中の物質混合過程へ及ぼす影響の解明及びデータベースの構築を行う。

(第三章)陰的 LES 法による物質混合を伴う圧縮性時間発展型の二次元噴流の数値計算を実行し、前章の DNS 法による計算結果と比較することにより圧縮性噴流中の物質混合予測に対する有効な陰的 LES 法を確立する。

(第四章)連成法における粒子領域で粒子の反応性物質濃度に対する圧縮性乱流中の分子拡散の寄与を混合体積モデルを用いて有効に計算するために、第二章の時間発展型二次元噴流の DNS データベースを用いたアプリオリテストを行い、圧縮性乱流中における粒子間の分子拡散過程の予測に対する有効な混合体積モデルを確立する。

(第五章)最後に本論文で得られた結論をまとめた。

1.4 主な記号

| | |
|------------|------------------------------|
| \hat{A} | : 変数 A の有次元数 |
| A_r | : 変数 A の代表値 |
| C_p | : 定圧比熱 |
| C_v | : 定積比熱 |
| c_J | : 初期噴流の音速 |
| D | : 物質拡散係数または拡散項 |
| dt | : 時間刻み |
| G | : カーネル関数 |
| H | : 噴流の出口幅 |
| k | : 熱伝導率 |
| L_x | : 計算領域の x 方向長さ |
| L_y | : 計算領域の y 方向長さ |
| L_z | : 計算領域の z 方向長さ |
| L_{sp} | : スポンジ領域の幅 |
| n | : 粒子番号またはタイムステップ数 |
| N_x | : x 方向の DNS 格子数または LES 格子数 |
| N_y | : y 方向の DNS 格子数または LES 格子数 |
| N_z | : z 方向の DNS 格子数または LES 格子数 |
| N_m | : 球状混合体積内の粒子数 |
| P | : 圧力 |
| P_a | : 標準大気圧 |
| R | : ガス定数 |
| r_m | : 球状混合体積の半径または閾値パラメーター |
| Sc | : シュミット数 |
| S | : サザーランド定数 |
| t | : 時間 |
| T | : 温度 |
| T_a | : 初期周囲流温度 |
| T_J | : 初期噴流温度 |
| T_0 | : 摂氏 0 度 |
| U | : 流れ方向初期平均速度 |
| V | : 噴流広がり方向初期平均速度 |
| W | : スパン方向初期平均速度 |
| u_x | : 流れ方向瞬間速度 |
| u_y | : 噴流広がり方向瞬間速度 |
| u_z | : スパン方向瞬間速度 |
| U_J | : 初期噴流の噴出速度 |
| μ_J | : 初期噴流のせん断粘性係数 |
| α_y | : y 方向格子幅設定用のパラメータ |

| | |
|---------------|---|
| x | : 流れ方向距離または座標 |
| \mathbf{x} | : 位置ベクトル |
| y | : 噴流広がり方向距離または座標 |
| z | : スパン方向距離また座標 |
| ρ | : 密度 |
| \mathbf{u} | : 速度ベクトル |
| τ | : 粘性応力テンソルまたは混合時間スケール |
| ϕ | : パッシブスカラーの濃度 |
| μ | : 粘性係数 |
| Δ | : 格子幅 |
| η | : コルモゴロフスケール |
| λ | : テイラーマイクロスケール |
| γ | : 比熱比 |
| δ_{ij} | : クロネッカーのデルタ |
| ϕ_J | : 噴流中心のパッシブスカラー濃度 |
| θ_J | : 初期せん断層厚さ |
| μ_0 | : 摂氏0度における空気のせん断粘性係数 |
| Θ | : 圧縮性強さを表す dilatation(= $\nabla \cdot \mathbf{u}$) |
| Ma_J | : 噴流マッハ数(= U_J/c_J) |
| Re_J | : 噴流レイノルズ数(= $U_J H P_a / \mu_J R T_J$) |

その他の定数と変数の定義については随時本文で説明する.

第2章

物質混合を伴う圧縮性二次元噴流の直接数値計算

2.1 緒言

本章では、DNS法による物質混合を伴う圧縮性二次元噴流データを利用した解析結果について述べる。前章で説明されたようにDNS法は主に乱流のモデリング計算手法の妥当性を検証するための基準計算手法として扱われており、特にシュミット数 $Sc \approx 1$ の気体流れでは流れ場と濃度場における乱れ構造の最小長さスケールが非常に相似しているため、DNS法で乱流における流れ場と濃度場を同時に数値計算しても全く同じ格子数の計算領域を使用することが可能であり、数値設定の簡便性と計算効率を考慮したうえで、DNS法による $Sc \approx 1$ の気体流れに関する基準データの構築が限られた計算資源をうまく活用する合理的な計算手段と認識されている。また、DNS法のシミュレーションに扱う高レイノルズ数の噴流は時間発展タイプの噴流^[40-42]と空間発展タイプの噴流^[16,17,43]に大別されている。噴流全体の様子を計算領域に再現する空間発展タイプに対して、時間発展タイプ用の計算領域には主流軸に垂直な各断面の噴流様子しか映されていない。そのため、全体的な噴流の空間発展を再現するための計算領域を確保する必要がなく、時間発展型のシミュレーションには限られた計算コストでより高レイノルズ数の流れの数値計算および統計量の解析が簡単に遂行できるという利点がある。本研究では圧縮性二次元噴流の乱流発達領域における乱流・混合特性の解明が主な目的のため、噴流レイノルズ数および噴流マッハ数を変化させた時間発展型噴流中の自己相似領域に対応した計算時間のDNSデータを統計的に解析し考察することで、今まで研究例の少ない流体の圧縮性による乱流混合特性の変化をそれぞれ明らかにした。本章の計算手法で計算されたデータは後章に説明された計算手法の有効性検証に基準を定める位置付けであり、さらに、微視的なパッシブスカラー散逸及び温度散逸の生成機構を量的に統計解析することでパッシブスカラー散逸と温度散逸の生成機構の相似性を論じ、微視的な温度変化をパッシブスカラー散逸でモデリングする可能性に確実な根拠を提供した。

2.2 圧縮性流体の支配方程式

本研究では、混合体積モデルを圧縮性流れ中の分子混合過程のモデリングに使う。圧縮性乱流中のパッシブスカラーの混合拡散過程を計算するための支配方程式は、以下に示す無次元化された質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式とパッシブスカラーの移流拡散方程式である。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial \rho T u_j}{\partial x_j} = -(\gamma - 1)P \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\gamma - 1}{Re} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varphi u_j}{\partial x_j} = \frac{1}{Sc Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right). \quad (2.4)$$

上式中の無次元変数の定義は(1.4)節に示されている。また、 $i = x, y, z$ と $j = x, y, z$ は x 方向、 y 方向と z 方向に対応する。 x 方向、 y 方向と z 方向の x_j は x, y, z である。上式が成立するためには、以下の仮定を行う必要がある。

(1) 扱う流体を理想気体し、圧力を次式の無次元化された状態方程式で求める。

$$P = \rho T. \quad (2.5)$$

(2) 単一成分の理想気体なので、化学反応項を無視する。

(3) 体積力による仕事を無視する。

(4) 拡散項はFick則に従う。

有次元数の無次元化や重要な無次元パラメーターは以下のように計算されている。

$$x_i = \frac{\hat{x}_i}{l_r}, u_i = \frac{\hat{u}_i}{u_r}, \rho = \frac{\hat{\rho}}{\rho_r}, t = \frac{\hat{t} u_r}{l_r}, P = \frac{\hat{P}}{\rho_r u_r^2}, \quad (2.6)$$

$$T = \frac{\hat{T} R}{u_r^2}, \varphi = \frac{\hat{\varphi}}{\varphi_r}, \mu = \frac{\hat{\mu}}{\mu_r}, k = \frac{\hat{k}}{k_r}, D = \frac{\hat{D}}{D_r}, \quad (2.7)$$

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}, R = c_p - c_v, Re = \frac{\rho_r u_r l_r}{\mu_r}, Pr = \frac{\mu_r c_p}{k_r}, Sc = \frac{\mu_r}{\rho_r D_r}. \quad (2.8)$$

ニュートン流体の粘性せん断応力 τ_{ij} は次式で示される。

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right). \quad (2.9)$$

ここで、クロネッカーデルタ δ_{ij} は以下のように定義される。

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}. \quad (2.10)$$

2.3 計算対象-時間発展型の二次元噴流

2.3.1 初期条件

本研究ではパッシブスカラー (物質濃度) の輸送拡散を伴う時間発展型の圧縮性二次元噴流を DNS で計算した。DNS の計算領域は図 (2.1) のような三次元の直方体である。直方体の x 方向 (流れ方向) 長さを L_x , y 方向 (噴流広がり方向) 長さを L_y , z 方向 (スパン方向) 長さを L_z とする。格子座標の原点は図 (2.1) に示す計算領域左側面の中心とする。 x 方向と z 方向の境界を周期境界とし, y 方向の境界を無反射境界とする。また, y 方向の境界付近に後述するスポンジゾーン (灰色領域) が設置され, その幅は $L_{sp} = 8H$ である。境界及びスポンジゾーンにおける物理量の計算スキームの詳細は 2.3.2 節で説明する。噴流出口幅 H はパラメータとして設定する噴流レイノルズ数 Re_J から以下の式で求められる。

$$H = l_r = \frac{Re_J \mu_J R T_J}{U_J P_a}. \quad (2.11)$$

ここで, ガス定数 $R = 287[\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})]$, 標準大気圧 $P_a = 1.013 \times 10^5 [\text{Pa}]$, 初期噴流温度 $T_J = 300[\text{K}]$ である。また, 初期噴流の噴出速度 U_J は設定する噴流マッハ数 Ma_J から, セン断粘性係数はサザーランドの式から以下のように求められる。

$$U_J = u_r = Ma_J \sqrt{\gamma R T_J}, \quad (2.12)$$

$$\mu_J = \mu_0 \left(\frac{T_J}{T_0} \right)^{1.5} \frac{T_0 + C_{su}}{T_J + C_{su}}. \quad (2.13)$$

ここで, 比熱比 $\gamma = 1.4$, $\mu_0 = \mu_r = 1.724 \times 10^{-5} [\text{Pa} \cdot \text{s}]$, $T_0 = 273[\text{K}]$, サザーランド定数 $C_{su} = 110.4[\text{K}]$ である。

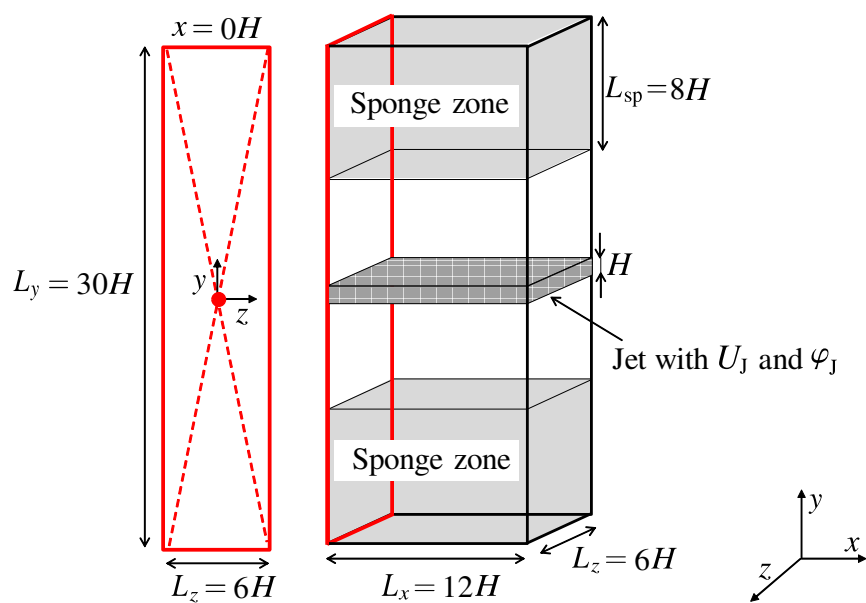


図 2.1 時間発展型二次元噴流の概略図. 左の平面図の赤点は座標の原点である.

格子点数の設定には2種類がある．1つが (N_x, N_y, N_z) と定義され，これは時間発展流れのDNSで用いられる．もう一つが $(N_{xin} = 200, N_{yin} = 350, N_{zin} = 100)$ と定義され，これは初期速度変動の生成に使用される．格子点の無次元座標 (x, y, z) と格子番号 $(i = -4, -3, \dots, N_x + 5, j = 1, 2, \dots, N_y, k = -4, -3, \dots, N_z + 5)$ の関係は次式の通りになる．

$$x(i) = i\Delta x, \quad (2.14)$$

$$y(j) = -0.5 \frac{L_y}{H} \operatorname{atanh} \left\{ \frac{\tanh(\alpha_y)}{\alpha_y} \left[1 - 2 \left(\frac{j-1}{N_y-2} \right) \right] \right\}, \quad (2.15)$$

$$z(k) = k\Delta z. \quad (2.16)$$

ここで， $\Delta x = L_x/(N_x H)$ ， $\Delta z = L_z/(N_z H)$ である．さらに， y 座標における y 方向格子幅 Δy の分布を図(2.2)で示した．噴流中心から離れるにつれ， Δy が大きくなる． α_y は格子間隔の y 方向依存性をコントロールするパラメータであり，本研究では $\alpha_y = 4$ とする．噴流における小スケールの変動特性を正確に再現するために，本研究では噴流中心周りの格子サイズをコルモゴロフスケールと同程度に設定する．初期変動用の格子点座標 (x_{in}, y_{in}, z_{in}) と格子番号 $(i_{in} = -4, -3, \dots, N_{xin} + 5, j_{in} = -4, -3, \dots, N_{yin} + 5, k_{in} = -4, -3, \dots, N_{zin} + 5)$ の関係は次式の通りとなる．

$$x_{in}(i_{in}) = i_{in}\Delta x_{in}, \quad (2.17)$$

$$y_{in}(j_{in}) = -0.5 \frac{L_y}{H} \operatorname{atanh} \left\{ \frac{\tanh(\alpha_y)}{\alpha_y} \left[1 - 2 \left(\frac{j_{in}-1}{N_{yin}-2} \right) \right] \right\}, \quad (2.18)$$

$$z_{in}(k_{in}) = k_{in}\Delta z_{in}. \quad (2.19)$$

ここで， $\Delta x_{in} = L_x/(N_{xin} H)$ ， $\Delta z_{in} = L_z/(N_{zin} H)$ である．

初期流れ場とパッシブスカラー場について以下のように与える，平均速度分布については，双曲線正接関数を用いたトップハット型を用いる．

$$\langle \hat{U} \rangle(y) = 0.5U_J + 0.5U_J \tanh \left(\frac{H-2|y|}{4\theta_J} \right), \quad (2.20)$$

$$\langle \hat{V} \rangle(y) = 0, \quad (2.21)$$

$$\langle \hat{W} \rangle(y) = 0. \quad (2.22)$$

ここで，運動量厚さ $\theta_J = 0.03H$ である．さらに，以下に述べる Kempf ら^[44]による変動生

成手法を用いた。

- (1) 不安定性の第一モードの波数の逆数である積分スケール $L_{in} = \theta_J/0.066\pi = 0.2H$ の乱流変動を取得するためには、乱数を初期値として拡散方程式の時間進行を計算する。ここで拡散係数 D_{in} は次式から定められる^[44]。

$$D_{in} = \frac{L_{in}^2}{2.0\pi dt_0 N_{in}}. \quad (2.23)$$

ここで、 $dt_0 = 0.5H/U_J$ は初期時間刻みであり、 $N_{in} = 400$ は計算時間ステップ数である。

- (2) 初期速度変動生成用の各格子点で速度三成分に対応する乱数 $(B_{xin}, B_{yin}, B_{zin})$ を与える。ここで、 B は $-1 \leq B \leq 1$ を満たす一様乱数である。また、格子サイズの効果を補正するため生成された乱数をさらに各格子点における格子体積の平方根で割る。3方向乱数 $(B_{xin}, B_{yin}, B_{zin})$ の拡散方程式を 400 時間ステップ計算する。各方向の境界を周期境界とする。拡散項は二次精度の中心差分法で離散化される。
- (3) 得られた乱数を分散が 1 となるように各格子における $(B_{xin}, B_{yin}, B_{zin}) = \mathbf{B}(x_{in}, y_{in}, z_{in})$ をそれぞれの r.m.s. 値で正規化する。
- (4) 速度変動の r.m.s. 値を $rms_{in} = 0.02U_J$ とした。なぜなら、これは発達した乱流領域中の噴流中心における速度変動の r.m.s. 値が速度平均値の 0.02 倍という噴流中の乱流特性が実験的な先行研究^[45-48] でよく見られているからである。噴流スリット内の速度変動場は次式のように得られる。

$$\hat{\mathbf{u}}''(x_{in}, y_{in}, z_{in}) = \begin{cases} rms_{in} * \mathbf{B}(x_{in}, y_{in}, z_{in}) & |y| < 0.5 \\ 0 & |y| \geq 0.5 \end{cases}. \quad (2.24)$$

さらに、初期格子位置における速度変動 $\hat{\mathbf{u}}''(x_{in}, y_{in}, z_{in})$ を DNS 格子位置に線形補間し、DNS 格子における速度変動 $\hat{\mathbf{u}}''(x, y, z)$ を平均流速 $(\langle \hat{U} \rangle(y), 0, 0)$ に加えることで、噴流の初期速度場を形成する。

初期速度場と同じように、パッシブスカラー場の初期値を次式により与える。

$$\hat{\varphi} = 0.5\varphi_J + 0.5\varphi_J \tanh\left(\frac{H - 2|y|}{4\theta_J}\right). \quad (2.25)$$

表 2.1 計算条件.

| | Run A | Run B | Run C | Run D |
|-----------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| Re_J | 14000 | 14000 | 14000 | 32000 |
| Ma_J | 0.6 | 1.6 | 2.6 | 1.6 |
| Sc | 1.0 | 1.0 | 1.0 | 1.0 |
| Pr | 0.7 | 0.7 | 0.7 | 0.7 |
| L_x, L_y, L_z | 12H, 30H, 6H | 12H, 30H, 6H | 12H, 30H, 6H | 6H, 26H, 4H |
| N_x, N_y, N_z | 2200, 1400, 1100 | 2200, 1400, 1100 | 2200, 1400, 1100 | 2100, 2300, 1400 |

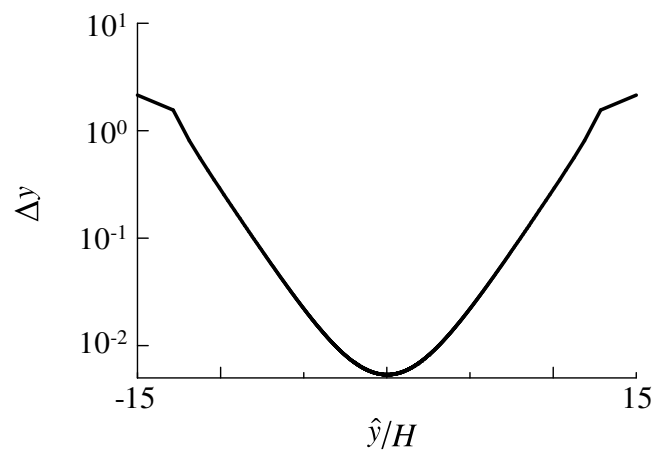
ここで、初期噴流ノズル内のパッシブスカラー濃度を φ_J とし、初期周囲流体中のパッシブスカラー濃度を 0 とする。

本計算では、周囲流体を温度 $T_a = T_J = 300[\text{K}]$ 、標準大気圧の理想気体と考える。また、噴流出口圧力と背圧の比が 1 である適正膨張噴流を仮定するので、全計算領域における圧力を一様の標準大気圧とする。噴流と周囲流体が接する領域、つまり $0 < \langle \hat{u}_x \rangle(y) < 1$ を満たす領域における温度の y 方向分布は Crocco-Busemann の関係式から次式のようなになる。

$$\hat{T}(y) = T_J \left\{ 1 + 0.5(\gamma - 1) \frac{\langle \hat{U}_1 \rangle(y)}{\langle \hat{U} \rangle_c} \left(1 - \frac{\langle \hat{U} \rangle(y)}{\langle \hat{U} \rangle_c} \right) Ma_J^2 \right\}. \quad (2.26)$$

本研究では、上記の初期条件設定を踏まえ、表 (2.1) にある 4 通りの (Re_J, Ma_J) の組み合わせに対して、直接数値計算を行った。

ここで、噴流マッハ数 Ma_J は噴流の圧縮性強さを表す指標になる。本計算においては、 $Ma_J = 0.6$ では圧縮性の影響が弱い流れ、 $Ma_J = 1.6$ では圧縮性の影響がある流れ、 $Ma_J = 2.6$ では圧縮性の強い流れを想定している。

図 2.2 Δy と y 座標の関係.

2.3.2 境界条件

時間発展型噴流では流れ方向 (x) とスパン方向 (z) の境界を周期境界とする。離散化手法で用いる差分式では隣の格子情報が必要になる。本計算では、周期境界から計算領域の外向きに格子を5個 ($x, z = 0$ の外に格子番号 $0, -1, -2, -3, -4$ とし、 $x, z = L_x, L_z$ の外に格子番号 $N_x + 1, N_x + 2, N_x + 3, N_x + 4, N_x + 5$ と $N_z + 1, N_z + 2, N_z + 3, N_z + 4, N_z + 5$ とする) 設置し、次式のように計算領域内の格子情報をこれらの格子に与える。

x 方向

$$f_{-4,j,k} = f_{N_x-4,j,k},$$

$$f_{-3,j,k} = f_{N_x-3,j,k},$$

$$f_{-2,j,k} = f_{N_x-2,j,k},$$

$$f_{-1,j,k} = f_{N_x-1,j,k},$$

$$f_{0,j,k} = f_{N_x,j,k},$$

$$f_{N_x+1,j,k} = f_{1,j,k},$$

$$f_{N_x+2,j,k} = f_{2,j,k},$$

$$f_{N_x+3,j,k} = f_{3,j,k},$$

$$f_{N_x+4,j,k} = f_{4,j,k},$$

$$f_{N_x+5,j,k} = f_{5,j,k},$$

z 方向

$$f_{i,j,-4} = f_{i,j,N_z-4},$$

$$f_{i,j,-3} = f_{i,j,N_z-3},$$

$$f_{i,j,-2} = f_{i,j,N_z-2},$$

$$f_{i,j,-1} = f_{i,j,N_z-1},$$

$$f_{i,j,0} = f_{i,j,N_z},$$

$$f_{i,j,N_x+1} = f_{i,j,1},$$

$$f_{i,j,N_z+2} = f_{i,j,2},$$

$$f_{i,j,N_z+3} = f_{i,j,3},$$

$$f_{i,j,N_z+4} = f_{i,j,4},$$

$$f_{i,j,N_z+5} = f_{i,j,5}.$$

ここで、 $f_{i,j,k}$ は格子点 $(x(i), y(j), z(k))$ の物理量である。

圧縮性噴流では、噴流外部に向けて圧力波が伝播する。数値シミュレーションでは有限な空間しか計算できないので、適切な境界条件を用いないと圧力波が境界で反射し噴流場に影響を与える。それを防ぐために、本計算では Lodato ら^[49] の 3D-NSCBC を使用した。次式で示されたように噴流広がり方向 (y 方向) の境界面における物理量の時間進行を計算する。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{\gamma T} [\zeta_2 + \frac{1}{2}(\zeta_5 + \zeta_1)] - \xi_1 = 0, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial t} + \frac{1}{2\rho\sqrt{\gamma T}}(\zeta_5 - \zeta_1) - \xi_2 = 0, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial t} + \zeta_3 - \xi_3 = 0, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial t} + \zeta_4 - \xi_4 = 0, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2}(\zeta_5 + \zeta_1) - \xi_5 = 0, \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \zeta_6 - \xi_6 = 0. \quad (2.32)$$

ここで、 ζ_i は y 方向の物理量のフラックスと圧力勾配から導かれた圧力波の振幅時間変化率であり、 ξ_i は境界面平行方向における物理量のフラックスと圧力勾配から導かれた transverse term である。これらの定義式は以下のようにベクトル ζ と ξ の形でまとめられている。

$$\text{境界面 } y = \frac{L_y}{2H}$$

$$\zeta = \begin{pmatrix} \sigma \frac{\sqrt{\gamma T}(1-Ma_{\max}(t)^2)}{L_y} (P - P_a) + (1 - \beta)(\zeta_5 - \rho\sqrt{\gamma T}\xi_2) \\ \lambda_2(\gamma T \frac{\partial \rho}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial y}) \\ \lambda_3 \frac{\partial u_x}{\partial y} \\ \lambda_4 \frac{\partial u_z}{\partial y} \\ \lambda_5(\frac{\partial P}{\partial y} + \rho\sqrt{\gamma T} \frac{\partial u_y}{\partial y}) \\ \lambda_6 \frac{\partial \varphi}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

$$\text{境界面 } y = -\frac{L_y}{2H}$$

$$\zeta = \begin{pmatrix} \lambda_1 \left(\frac{\partial P}{\partial y} - \rho \sqrt{\gamma T} \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \\ \lambda_2 \left(\gamma T \frac{\partial \rho}{\partial y} - \frac{\partial p}{\partial y} \right) \\ \lambda_3 \frac{\partial u_x}{\partial y} \\ \lambda_4 \frac{\partial u_z}{\partial y} \\ \sigma \frac{\sqrt{\gamma T} (1 - Ma_{\max}(t)^2)}{L_y} (P - P_a) + (1 - \beta)(\xi_5 + \rho \sqrt{\gamma T} \xi_2) \\ \lambda_6 \frac{\partial \varphi}{\partial y} \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

ここで、境界面 $y = \frac{L_y}{2H}$ における ζ_1 と境界面 $-\frac{L_y}{2H}$ における ζ_5 は内向きの波である。 Ma_{\max} は時間 t における全計算領域内の最大マッハ数である。 $\sigma = 0.25$ は圧力緩和係数であり、 $\beta = Ma_j$ は transverse 減衰パラメータである。圧力波の伝播速度 λ_i は以下のように定義されている。

$$\lambda_1 = u_y - \sqrt{\gamma T}, \lambda_{2,3,4,6} = u_y, \lambda_5 = u_y + \sqrt{\gamma T}. \quad (2.35)$$

また、transverse term である ξ_i もベクトル ξ の形で以下のようにまとめられる。

$$\xi = \begin{pmatrix} -\frac{\partial \rho u_m}{\partial x_m} \\ -u_m \frac{\partial u_y}{\partial x_m} \\ -u_m \frac{\partial u_x}{\partial x_m} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \\ -u_m \frac{\partial u_z}{\partial x_m} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} \\ -u_m \frac{\partial P}{\partial x_m} - \gamma P \frac{\partial u_m}{\partial x_m} \\ -u_m \frac{\partial \varphi}{\partial x_m} \end{pmatrix} (m = x, z). \quad (2.36)$$

さらに、粘性項と拡散項に対する境界条件式は以下のように示される。

$$\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} = \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D \frac{\partial T}{\partial y} \right). \quad (2.37)$$

NSCBC は境界面に垂直な圧力波して得られる境界条件である。圧力波が境界に達する前にその振幅を抑え、数値計算領域における境界から反射された波が噴流中心における自由乱流構造に影響しないためにスポンジ領域 ($|y| \geq L_y/(2H) - L_{sp}/H$) を設置した。その分、本来スポンジ領域に存在すべき物理的な圧力波構造が以下に示されるローパスフィルタ^[50]の数値粘性で散逸される。フィルタの強さは係数 A_{sp} によって決まり、フィルタは境

界に近いほど強くなる．点 $(x(i), y(j), z(k))$ における物理量 $f_{i,j,k}$ にローパスフィルタが適用された後の値を $g_{i,j,k}$ とすると，ローパスフィルタは次式となる．

x 方向

$$g_{i,j,k} = (1 - A_{sp}(j)) f_{i,j,k} + A_{sp}(j) \left(\frac{f_{i+1,j,k}}{4} + \frac{f_{i,j,k}}{2} + \frac{f_{i-1,j,k}}{4} \right), \quad (2.38)$$

y 方向

$$g_{i,j,k} = \left\{ \begin{array}{ll} (1 - A_{sp}(j)) f_{i,j,k} + A_{sp}(j) \left(\frac{f_{i,j+1,k}}{4} + \frac{f_{i,j,k}}{2} + \frac{f_{i,j-1,k}}{4} \right) & (2 \leq j \leq N_y - 1), \\ (1 - A_{sp}(j)) f_{i,j,k} + A_{sp}(j) \left(\frac{f_{i,j+1,k}}{2} + \frac{f_{i,j,k}}{2} \right) & (j = 1), \\ (1 - A_{sp}(j)) f_{i,j,k} + A_{sp}(j) \left(\frac{f_{i,j,k}}{2} + \frac{f_{i,j-1,k}}{2} \right) & (j = N_y), \end{array} \right\} \quad (2.39)$$

z 方向

$$g_{i,j,k} = (1 - A_{sp}(j)) f_{i,j,k} + A_{sp}(j) \left(\frac{f_{i,j,k+1}}{4} + \frac{f_{i,j,k}}{2} + \frac{f_{i,j,k-1}}{4} \right). \quad (2.40)$$

ここで $A_{sp}(j)$ はスポンジ領域の始めで 0 となり計算領域境界で 1 となるように次の式を用いて定義する．

$$A_{sp}(j) = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left\{ B_{sp} \frac{|y|H - (L_y/2 - L_{sp})}{L_{sp}} - C_{sp} \right\} \right]. \quad (2.41)$$

ここで B_{sp} , C_{sp} は定数で $B_{sp} = 7$, $C_{sp} = 0.5$ とした．

2.4 計算手法-陽的離散化スキーム

2.4.1 空間微分

支配方程式にある偏微分項に対しては、以下のような陽的八次精度中心差分法^[51]で直接計算する。

$$\frac{\partial f_{i,j,k}}{\partial x} = \frac{4(f_{i+1,j,k} - f_{i-1,j,k})}{5\Delta x} - \frac{(f_{i+2,j,k} - f_{i-2,j,k})}{5\Delta x} + \frac{4(f_{i+3,j,k} - f_{i-3,j,k})}{105\Delta x} - \frac{(f_{i+4,j,k} - f_{i-4,j,k})}{280\Delta x}, \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial f_{i,j,k}}{\partial y} = \frac{4(f_{i,j+1,k} - f_{i,j-1,k})}{5\Delta y} - \frac{(f_{i,j+2,k} - f_{i,j-2,k})}{5\Delta y} + \frac{4(f_{i,j+3,k} - f_{i,j-3,k})}{105\Delta y} - \frac{(f_{i,j+4,k} - f_{i,j-4,k})}{280\Delta y}, \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial f_{i,j,k}}{\partial z} = \frac{4(f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1})}{5\Delta z} - \frac{(f_{i,j,k+2} - f_{i,j,k-2})}{5\Delta z} + \frac{4(f_{i,j,k+3} - f_{i,j,k-3})}{105\Delta z} - \frac{(f_{i,j,k+4} - f_{i,j,k-4})}{280\Delta z}. \quad (2.44)$$

ここで、物理量の二階微分を求める際には、一階微分量に対して再度一階微分を適用する。2.3.2節で説明されたように、周期境界の両側に既知な物理量が存在するので、 x と z 方向における境界点の微分項には上記の式が適用できるが、 y 方向境界付近では既知な物理量が計算領域内部にしかない。そのため、境界付近の数値安定性を維持するために、 y 方向境界付近の格子点における微分項は次数の低い以下の式で離散化される。

$$\frac{\partial f_{i,1,k}}{\partial y} = \frac{1}{6\Delta y} (-11f_{i,1,k} + 18f_{i,2,k} - 9f_{i,3,k} + 2f_{i,4,k}), \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial f_{i,2,k}}{\partial y} = \frac{1}{6\Delta y} (-2f_{i,1,k} - 3f_{i,2,k} + 6f_{i,3,k} - f_{i,4,k}), \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial f_{i,3,k}}{\partial y} = \frac{1}{12\Delta y} (f_{i,1,k} - 8f_{i,2,k} + 8f_{i,4,k} - f_{i,5,k}), \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial f_{i,4,k}}{\partial y} = \frac{1}{60\Delta y} (-f_{i,1,k} + 9f_{i,2,k} - 45f_{i,3,k} + 45f_{i,5,k} - 9f_{i,6,k} + f_{i,7,k}), \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial f_{i,Ny-3,k}}{\partial y} = \frac{1}{60\Delta y} (-f_{i,Ny,k} + 9f_{i,Ny-1,k} - 45f_{i,Ny-2,k} + 45f_{i,Ny-4,k} - 9f_{i,Ny-5,k} + f_{i,Ny-6,k}), \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial f_{i,Ny-2,k}}{\partial y} = \frac{1}{12\Delta y} (f_{i,Ny,k} - 8f_{i,Ny-1,k} + 8f_{i,Ny-3,k} - f_{i,Ny-4,k}), \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial f_{i,Ny-1,k}}{\partial y} = \frac{1}{6\Delta y} (-2f_{i,Ny,k} - 3f_{i,Ny-1,k} + 6f_{i,Ny-2,k} - f_{i,Ny-3,k}), \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial f_{i,Ny,k}}{\partial y} = \frac{1}{6\Delta y} (-11f_{i,Ny,k} + 18f_{i,Ny-1,k} - 9f_{i,Ny-2,k} + 2f_{i,Ny-3,k}). \quad (2.52)$$

2.4.2 時間積分

格子点における物理情報を時間的に発展させるには、偏微分方程式の解を数値的に解く方法が必要となる。高いレイノルズ数ではオイラー項と粘性項の大きさの差が非常に大きいことを考慮し、本計算ではオイラー項(移流項と圧力項)を陽的五段階四次精度ルンゲクッタ法で、粘性項と拡散項を一次精度オイラー法で解く^[50]。

陽的五段階四次精度ルンゲクッタ法の計算式は以下のように示される。

$$df_{(m,n)} = A_m df_{(m-1,n)} + \Delta t \cdot \text{RHS}(f_{(m-1,n)}), \quad (2.53)$$

$$f_{(m,n)} = f_{(m-1,n)} + B_m df_{(m,n)}. \quad (2.54)$$

ここで $m = 1, 2, 3, 4, 5$ は段数であり、係数 A_m, B_m は表(2.2)のとおりである。 f_m は段数 m での値とする。RHS は変数 f に関する微分方程式の右辺を意味する。なお、 $m = 0$ はその計算時間ステップ n での値を表す。時間刻み幅 Δt をクーラン数が一定となるように定めている。全計算領域内の格子における仮時間刻み幅 Δt_f の計算式を以下に示す。

$$\Delta t_f = \text{CFL} \times \left[1 / \left\{ \left(\frac{|u_x|}{\Delta x} + \frac{|u_y|}{\Delta y_c} + \frac{|u_z|}{\Delta z} \right) + \sqrt{\frac{\gamma R T_j}{U_j^2} \times \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y_c^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)} \right\} \right]. \quad (2.55)$$

ここで、クーラン条件を満たすために、クーラン数は $\text{CFL} = 0.9$ とした。また、格子幅が最も小さい平面 $y = 0$ での仮時間刻み幅から Δt_f の最小値を見つけ出し、これを時間刻み幅 Δt として、時間進行の計算に用いた。 Δy_c は y 方向の格子点番号が $j (j = 1, 2, \dots, N_y)$ のとき $\Delta y_c = (y_{j+1} - y_{j-1})/2$ である。この計算法は Carpenter ら^[52]により示され、従来の四次精度の Runge-Kutta 法と比較してより少ない計算ストレージで計算でき、安定性においても優れている。

RHS(f) は式(2.1-2.4)により次の式の通りに計算する。

$$\text{RHS}(\rho) = -\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j}, \quad (2.56)$$

$$\text{RHS}(\rho u_i) = -\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial P}{\partial x_i}, \quad (2.57)$$

$$\text{RHS}(\rho T) = -\frac{\partial \rho T u_j}{\partial x_j} - (\gamma - 1) P \frac{\partial u_j}{\partial x_j}, \quad (2.58)$$

$$\text{RHS}(\rho \varphi) = -\frac{\partial \rho \varphi u_j}{\partial x_j}. \quad (2.59)$$

表 2.2 5 段階 4 次精度のルンゲクッタ法に用いる係数.

| A_1 | A_2 | A_3 | A_4 | A_5 |
|------------------------------------|-------------------------------------|--|--------------------------------------|--------------------------------------|
| 0 | $-\frac{73838075589}{153778244506}$ | $-\frac{6194124222391}{4410992767914}$ | $-\frac{875753879689}{434298951106}$ | $-\frac{375951423649}{355864889808}$ |
| B_1 | B_2 | B_3 | B_4 | B_5 |
| $\frac{69922298306}{679754813293}$ | $\frac{151102391305}{203957027379}$ | $\frac{168159696081}{226431017777}$ | $\frac{189406283338}{403426599621}$ | $\frac{184809359603}{982122979183}$ |

ここで移流項については歪対称の形で計算した．粘性項と拡散項については陽的一次精度の Euler 法を用いて次の式の通りに計算する．

$$f_{(0,n+1)} = f_{(5,n)} + \Delta t \cdot df. \quad (2.60)$$

ここで f_5 は Runge-Kutta 法の計算における五段階目の値であり． $f_{(0,n+1)}$ はタイムステップ $n+1$ での値である．変化量 df については式 (2.3-2.4) について次の通りに計算する．

$$d\rho u_i = \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.61)$$

$$d\rho T = \frac{\gamma}{Re Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\gamma-1}{Re} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad (2.62)$$

$$d\rho \varphi = \frac{1}{Sc Re} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right). \quad (2.63)$$

2.4.3 フィルタリング

いかなる小さな格子を用いて数値計算を実行しても、数値的な誤差が必ず存在する。例えば、差分法による打ち切り誤差があることで非物理的な波が生じてしまい、これらの波の相互作用でさらに高周波数の数値振動が形成され、計算が不安定化になる。数値振動を抑制するために、本計算では中心差分スキームに基付いた陽の十次精度ローパスフィルタ^[51]で人工粘性を付加し、高波数の数値振動を散逸させる。点 $(x(i), y(j), z(k))$ における物理量 $f_{i,j,k}$ にローパスフィルタが適用された後の値を $g_{i,j,k}$ とすると、ローパスフィルタは次の式となる。

y 方向境界付近

$$g_{i,1,k} = f_{i,1,k} - 2^{-10} (f_{i,1,k} - 5f_{i,2,k} + 10f_{i,3,k} - 10f_{i,4,k} + 5f_{i,5,k} - f_{i,6,k}), \quad (2.64)$$

$$g_{i,2,k} = f_{i,2,k} - 2^{-10} (-5f_{i,1,k} + 26f_{i,2,k} - 55f_{i,3,k} + 60f_{i,4,k} - 35f_{i,5,k} + 10f_{i,6,k} - f_{i,7,k}), \quad (2.65)$$

$$g_{i,3,k} = f_{i,3,k} - 2^{-10} (10f_{i,1,k} - 55f_{i,2,k} + 126f_{i,3,k} - 155f_{i,4,k} + 110f_{i,5,k} - 45f_{i,6,k} + 10f_{i,7,k} - f_{i,8,k}), \quad (2.66)$$

$$g_{i,4,k} = f_{i,4,k} - 2^{-10} (-10f_{i,1,k} + 60f_{i,2,k} - 155f_{i,3,k} + 226f_{i,4,k} - 205f_{i,5,k} + 120f_{i,6,k} - 45f_{i,7,k} + 10f_{i,8,k} - f_{i,9,k}), \quad (2.67)$$

$$g_{i,5,k} = f_{i,5,k} - 2^{-10} (5f_{i,1,k} - 35f_{i,2,k} + 110f_{i,3,k} - 205f_{i,4,k} + 251f_{i,5,k} - 210f_{i,6,k} + 120f_{i,7,k} - 45f_{i,8,k} + 10f_{i,9,k} - f_{i,10,k}). \quad (2.68)$$

ここで、格子番号 $j = 1, \dots, 5$ の y 方向境界付近の式だけが示されているが、格子番号 $j = Ny - 4, \dots, Ny$ の y 方向境界付近の式はそれぞれ式 (2.65-2.68) に対応している。

計算領域内部

x 方向

$$g_{i,j,k} = f_i - 2^{-10} [252f_{i,j,k} - 210(f_{i+1,j,k} + f_{i-1,j,k}) + 120(f_{i+2,j,k} + f_{i-2,j,k}) - 45(f_{i+3,j,k} + f_{i-3,j,k}) + 10(f_{i+4,j,k} + f_{i-4,j,k}) - (f_{i+5,j,k} + f_{i-5,j,k})], \quad (2.69)$$

y 方向

$$g_{i,j,k} = f_i - 2^{-10} [252f_{i,j,k} - 210(f_{i,j+1,k} + f_{i,j-1,k}) + 120(f_{i,j+2,k} + f_{i,j-2,k}) - 45(f_{i,j+3,k} + f_{i,j-3,k}) + 10(f_{i,j+4,k} + f_{i,j-4,k}) - (f_{i,j+5,k} + f_{i,j-5,k})], \quad (2.70)$$

z 方向

$$g_{i,j,k} = f_i - 2^{-10}[252f_{i,j,k} - 210(f_{i,j,k+1} + f_{i,j,k-1}) + 120(f_{i,j,k+2} + f_{i,j,k-2}) - 45(f_{i,j,k+3} + f_{i,j,k-3}) + 10(f_{i,j,k+4} + f_{i,j,k-4}) - (f_{i,j,k+5} + f_{i,j,k-5})]. \quad (2.71)$$

これらの式にある数字がすべて十次精度フィルター用の散逸行列の要素^[51]になる。フィルターの散逸機能を果たすためには、散逸行列の固有値が負の値になければならない。

2.4.4 計算手順

図 2.3 に、数値計算法のフローチャートを示す。

<手順 1>

MPI を用いた並列計算のために、計算領域を y, z 方向に分割する。

<手順 2>

計算に用いる領域上に計算格子を生成する (メッシュ生成)。

<手順 3>

初期条件として噴流ノズルと周囲流の流入条件を計算する。すでに計算した値を用いる場合はそれを読み込む。

手順 4 から手順 7 までは現在のタイムステップ n を用いて説明する。

<手順 4>

時間刻み幅 Δt を計算し、次のタイムステップでの時刻 t_{n+1} を計算する。

<手順 5>

タイムステップ n での物理量を用い、差分法で歪対称の形^[53] で定式化された移流項および圧力項 (非粘性項) を計算し、各格子における物理量を更新する。五段階四次精度のルンゲ・クッタ法を使用することにより、この計算プロセスを 5 回繰り返す。ここで、反復回数を Num_RK とする。

<手順 6>

数値安定性を保つために、ローパスフィルターで全計算領域における数値振動を吸収し、スポンジで y 方向境界付近における波を吸収する。

<手順 7>

手順 5 で更新された物理量を用い、差分法で粘性項と拡散項を計算し、一次精度のオイラー法で次のタイムステップ $n+1$ における物理量を求める。

<手順 8>

次のタイムステップでの時刻が規定の計算終了時刻 t_{last} を超えない場合は次のタイムステップに進み手順 4 に戻る。時刻が t_{last} を超えたら計算を終了する。

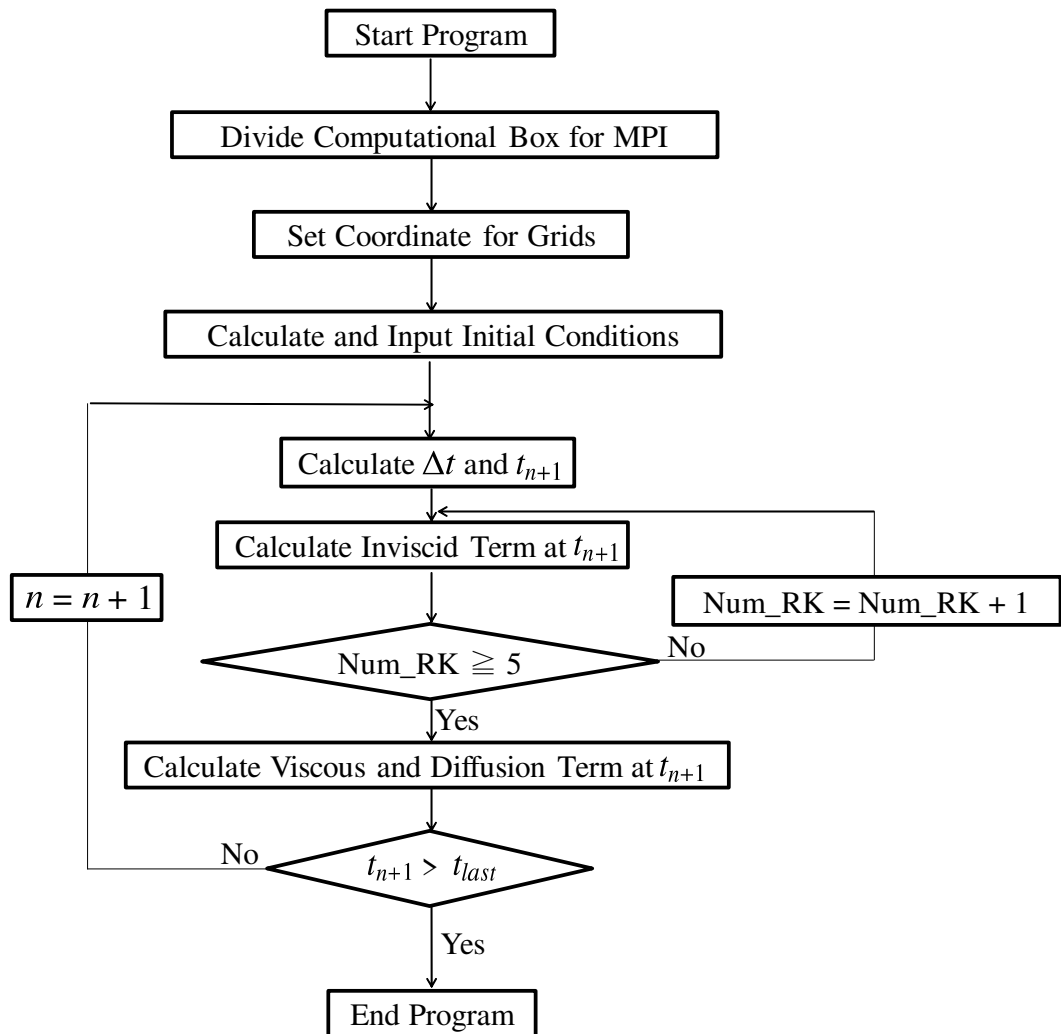


図2.3 数値計算法フローチャート.

2.5 計算結果

2.5.1 自己相似領域における特性パラメータの調査

時間発展型二次元噴流のDNS結果を解析することで、噴流の時間変化や主に噴流の自己相似領域の統計な特性について調べる。各計算条件において、自己相似領域 (Run A, Run B と Run C の $t = 22$ と Run D の $t = 18$ における計算データ) の噴流中心の乱流特性を以下の表 (2.3) にまとめた。ここで、乱流渦の最小スケールであるコルモゴロフスケール $\hat{\eta}$ と乱れ強度の減衰散逸と関連するスケールであるテイラーマイクロスケール $\hat{\lambda}$ はそれぞれ以下のように定義される。

$$\hat{\eta} = \left(\frac{\langle \hat{\mu} \rangle_c}{\langle \hat{\rho} \rangle_c} \right)^{3/4} \left\langle \frac{\hat{\tau}_{ij} \hat{s}_{ij}}{\hat{\rho}} \right\rangle_c^{-1/4}, \quad (2.72)$$

$$\hat{\lambda} = \frac{\langle \hat{u}'^2 \rangle_c^{1/2}}{\langle (\frac{\partial \hat{u}'}{\partial x})^2 \rangle_c^{1/2}}. \quad (2.73)$$

ここで、 $\langle A \rangle_c$ は x - z 平面上の格子データ A をサンプルとした平均値であり、添え字 c は噴流中心を表す。格子幅が $\hat{\eta}$ の 1.5 倍以下の大きさとなっており、本計算のメッシュ生成が妥当であることがわかった。また、乱流レイノルズ数と乱流マッハ数は以下のように定義される。

$$Re_\lambda = \frac{\langle \hat{\rho} \rangle_c \langle \hat{u}'^2 \rangle_c^{1/2} \hat{\lambda}}{\langle \hat{\mu} \rangle_c}, \quad (2.74)$$

$$M_\lambda = \frac{\langle \hat{u}'_i \hat{u}'_i \rangle_c^{1/2}}{\langle \sqrt{\gamma R \hat{T}} \rangle_c}. \quad (2.75)$$

表 2.3 自己相似領域の統計的な乱流特性.

| | Run A | Run B | Run C | Run D |
|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| $\Delta_x = \Delta_z$ | 1.46η | 1.32η | 1.17η | 1.46η |
| $\hat{\eta}$ | $3.7 \times 10^{-3}H$ | $4.1 \times 10^{-3}H$ | $4.7 \times 10^{-3}H$ | $2.0 \times 10^{-3}H$ |
| $\hat{\lambda}$ | $7.9 \times 10^{-2}H$ | $8.4 \times 10^{-2}H$ | $8.9 \times 10^{-2}H$ | $5.6 \times 10^{-2}H$ |
| Re_λ | 117 | 112 | 109 | 228 |
| M_λ | 0.11 | 0.28 | 0.45 | 0.36 |

2.5.2 スカラー場の可視化

自己相似領域におけるパッシブスカラー場を可視化したものを図(2.4)に示す。図(2.4)(a), (b), (c)の時間が $22H/U_J$ であり, 図(2.4)(d)の時間が $18H/U_J$ である。マッハ数の増加とともに, せん断層における乱れの生成が阻害され, 自己相似領域(乱れ構造が存在する領域)まで発達するのに要する時間が長くなる^[54]。パッシブスカラー場の時間発展にもその影響は見られ, 同じ時間において, 図(2.4)(a), (b)と(c)から噴流マッハ数 Ma_J が高くなるにつれスカラーの値が大きくなることが観察され, 初期噴流中心の真赤($\varphi = 1$)に周囲流を巻き込む乱流混合速度が遅くなることが確認できた。また, 図(2.4)(b)と(d)の比較により, より高いレイノルズ数では, より小スケールのパッシブスカラー変動が現れていることがコルモゴロフスケール $\hat{\eta}$ とレイノルズ数 Re の間に $\hat{\eta} \sim Re^{-3/4}$ の関係が成り立つ^[55]ことから解釈できる。

自己相似領域における温度場(アクティブスカラー場)を可視化したものを図(2.5)に示す。図(2.5)(a), (b)の時間が $22H/U_J$ であり, 図(2.5)(c)の時間が $18H/U_J$ である。コンターの色は初期噴流温度 T_J で正規化された温度になる。噴流マッハ数により, 温度の増加量も変化する。式(2.26)のCrocco-busemann関係式では, せん断領域内の温度と初期噴流温度の差はマッハ数の2乗に比例して増加する。また, 高温のせん断層から熱が噴流中心に拡散される。また粘性散逸により運動エネルギーが熱に変換され流体を加熱するのに加えて, マッハ数の増加に伴い熱に変換される運動エネルギーが多くなり, 温度の上昇量が増える。これは図(2.5)(a)と(b)の比較からわかる。さらに, 高マッハ数では周囲流体へJet crackle構造^[56]のような波が伝播されることが確認できた。パッシブスカラー場と同様に, レイノルズ数の高い図(2.5)(c)での噴流中心における温度変動の長さスケールは図(2.5)(a)のそれより小さくなった。

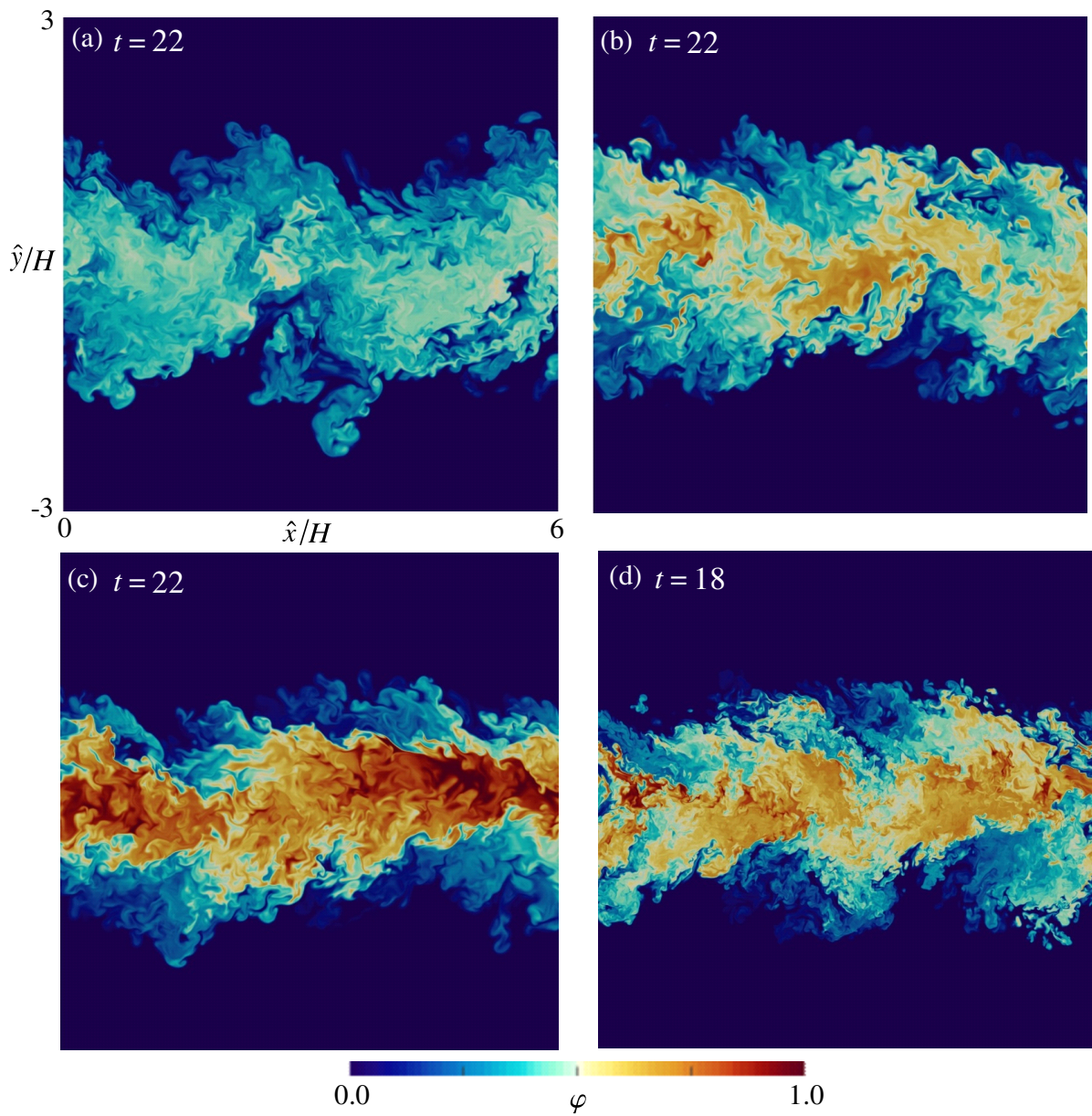
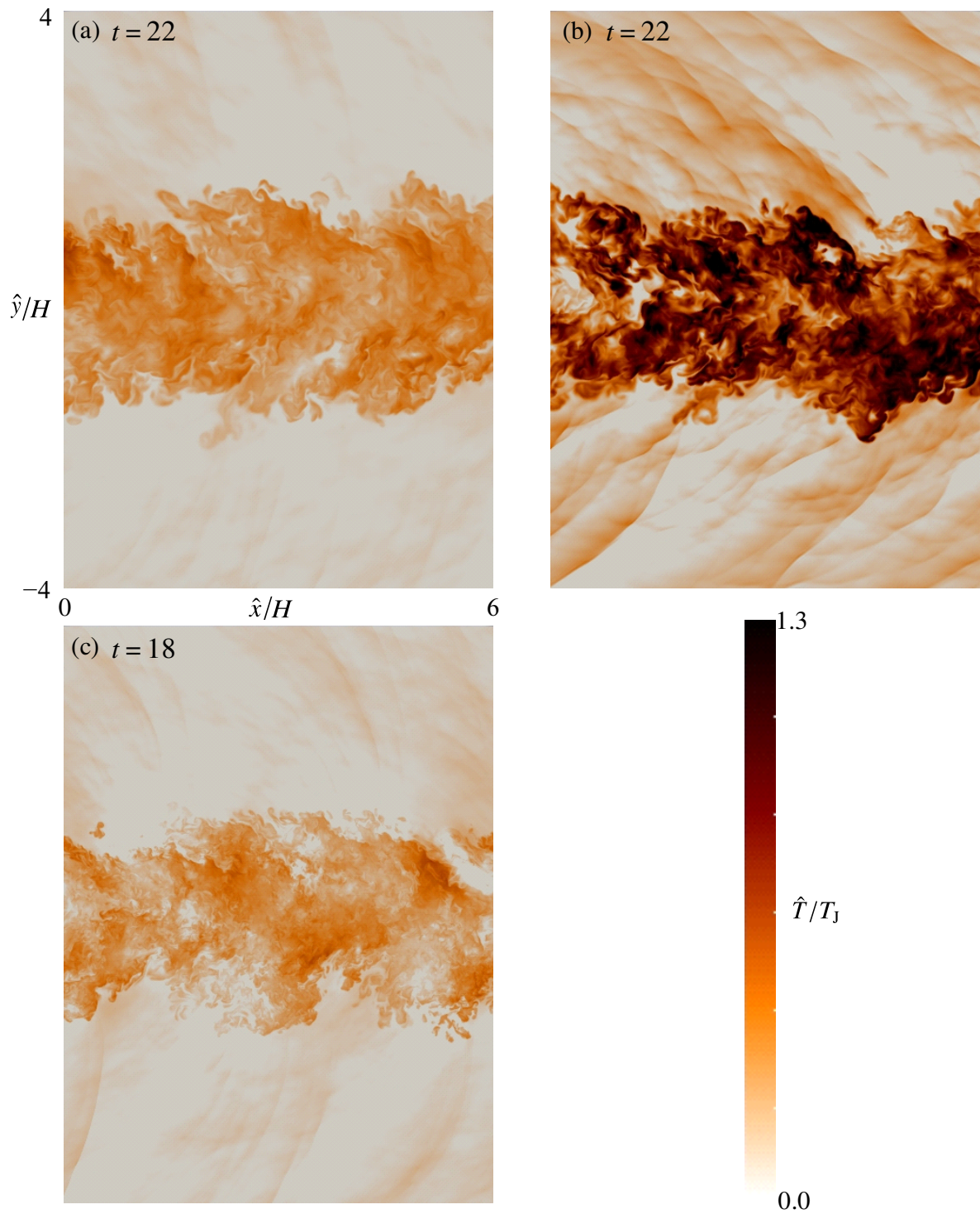


図2.4 x - y 平面におけるパッシブスカラー場:(a)Run A ($t = 22$), (b)Run B ($t = 22$), (c)Run C ($t = 22$), (d) Run D ($t = 18$).

図 2.5 x - y 平面における温度場 : (a) Run B ($t = 22$), (b) Run C ($t = 22$), (c) Run D ($t = 18$).

2.5.3 半値幅の時間推移

流れ方向の平均速度場と平均パッシブスカラーの y 方向分布における半値幅 b_U と b_φ の時間変化を図 (2.6) に示す。半値幅は平均値が噴流中心値の 0.5 倍となる y 方向位置として定義されている。これらの統計量が $y = 0$ に対して対称であるため、本計算では $y > 0$ と $y < 0$ のそれぞれに対して半値幅となる格子点を見つけ出し、2つの y 座標の絶対値を平均した値を半値幅として用いた。時間発展型二次元噴流の自己相似領域では半値幅は時間 t に対して $t^{1/2}$ に比例して成長することがよく知られている。図 (2.6) では速度場とパッシブスカラー場に関わらず、噴流が発達する前には半値幅は一定値 $0.5H$ を取り ($b_U^2 = b_\varphi^2 = 0.25H^2$)、流れが自己相似領域に発達すると半値幅の二乗が時間に比例して増加することが確認できた。マッハ数の増加とともに、半値幅が $t^{1/2}$ に比例して増加する領域が遅い時間に現れるようになる。これは高マッハ数ではポテンシャルコア領域が長くなり、乱流への遷移が遅れるためである。また、 $b_U^2 < b_\varphi^2$ の大小関係も過去の実験的な研究結果と一致する [57–59]。

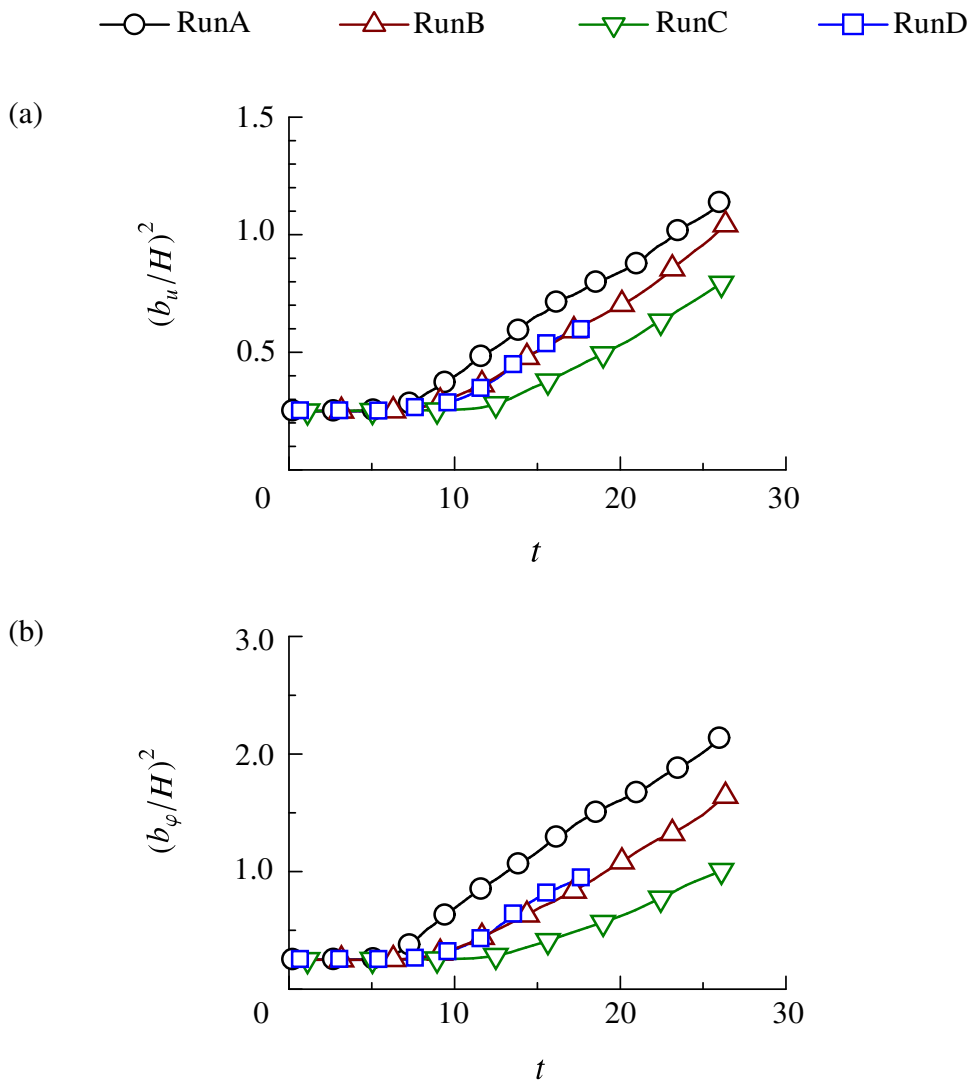


図 2.6 半値幅の時間発展 : (a) 流れ方向平均速度の半値幅, (b) 平均パッシブスカラーの半値幅.

2.5.4 噴流広がり方向における平均値及び r.m.s. 値

図(2.7)に流れ方向速度 u_x とパッシブスカラー φ の平均値の y 方向分布を示す。縦軸と横軸はそれぞれ噴流中心における平均値と半値幅で正規化されている。本計算結果を過去の非圧縮性平面噴流の実験結果^[45]と比較することで、マッハ数とレイノルズ数に関係なく、実験結果と同様な分布が確認できた。

図(2.8)に流れ方向速度変動、噴流広がり方向速度変動、スパン方向速度変動とパッシブスカラー変動の r.m.s. 値の y 方向分布を示す。変動値 A'' は $A'' = A - \langle A \rangle$ と計算されている。速度変動 r.m.s. 値については中心の平均速度で、スカラー変動 r.m.s. 値については中心のスカラーの平均値で正規化されている。ここでは下付きの添え字 rms が変動の r.m.s. 値を指す。過去の非圧縮性二次元噴流の実験結果^[45-48]と同様に、半値幅付近で $(u_x)_{rms}$, $(u_z)_{rms}$ と φ_{rms} に極大値が表れる。マッハ数の増加とともに、 y 方向速度変動 r.m.s. 値 $(u_y)_{rms}$, スパン方向速度変動 $(u_z)_{rms}$ が乱流領域において小さくなる。このようなマッハ数の増加による乱流変動の減少は、過去の圧縮性せん断層に関する研究^[60]でも確認されている。

□△ Experiments — RunA - - - RunB - · - RunC — RunD

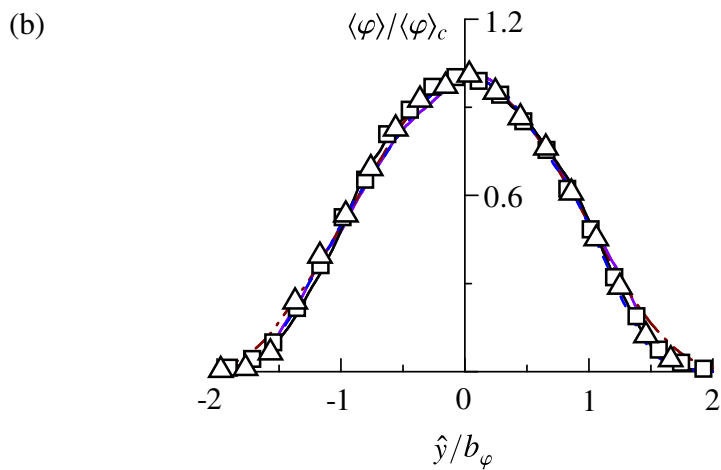
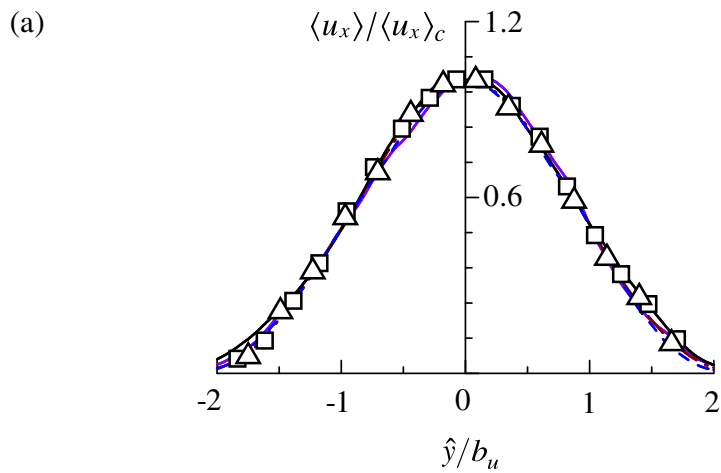


図2.7 自己相似領域における平均値のy方向分布：(a) 平均流れ方向速度，(b) 平均パッシブスカラー．本DNS法の計算結果(線)を実験結果(点)^[45]と比較する．

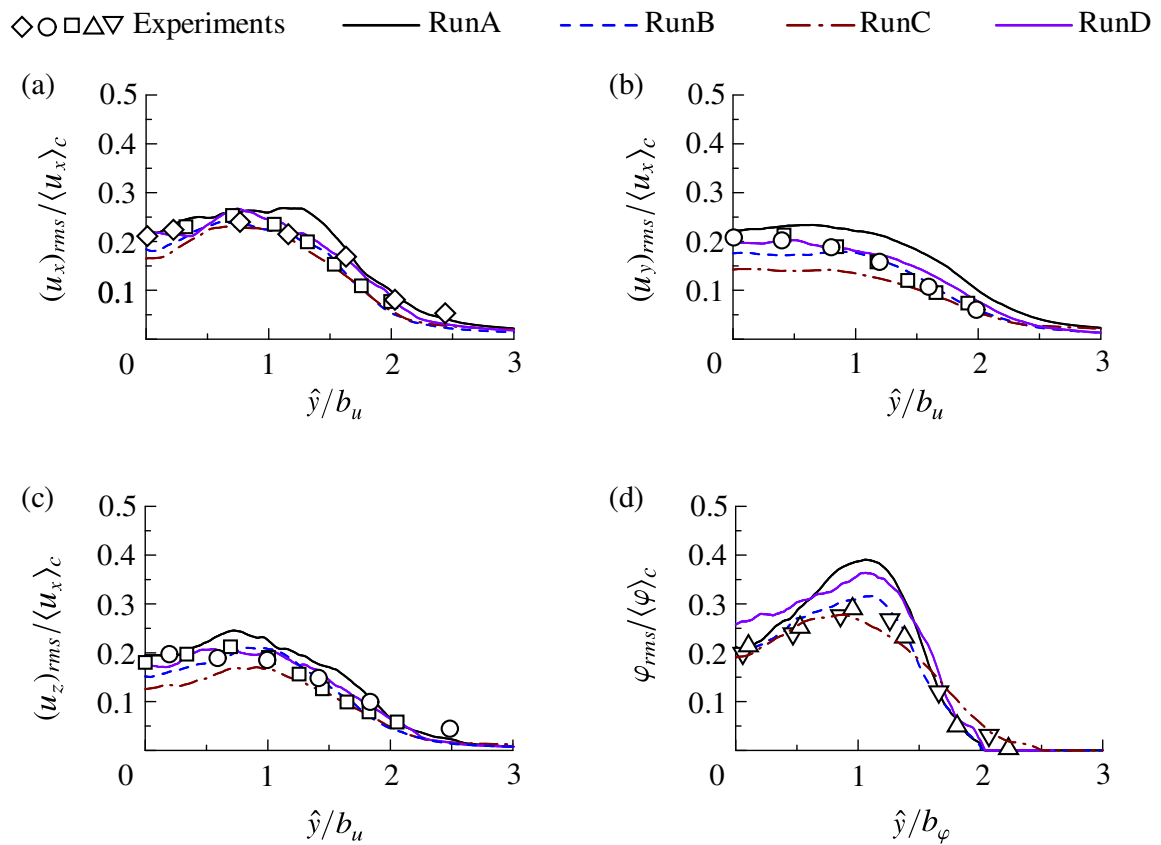


図 2.8 自己相似領域における速度変動およびスカラー変動の r.m.s. 値の y 方向分布：(a) 流れ (x) 方向の変動速度 r.m.s. 値，(b) y 方向の変動速度 r.m.s. 値，(c) スパン z 方向の変動速度 r.m.s. 値，(d) パッシブスカラー変動 r.m.s. 値．本 DNS 法の計算結果 (線) を実験結果 (点) [45-48] と比較する．

2.5.5 スカラー散逸率の生成項

本節ではスカラー場における小スケールの特性を調べた。乱流による流体変形は小スケールのスカラー拡散を促進する。すなわち、スカラー場と速度場のカップリング作用でスカラー勾配が増幅される。パッシブスカラー変動とアクティブスカラー変動(温度変動)に対する散逸率の生成項 P_φ と P_T は以下のように書ける。

$$P_\varphi = -\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} s_{ij} \frac{\partial\varphi}{\partial x_j} = -\frac{\partial\varphi}{\partial x_i} s_{ij}^* \frac{\partial\varphi}{\partial x_j} - \frac{\partial\varphi}{\partial x_i} \frac{\partial\varphi}{\partial x_i} s_{kk} \equiv P_\varphi^* + P_\varphi^d, \quad (2.76)$$

$$P_T = -\frac{\partial T}{\partial x_i} s_{ij} \frac{\partial T}{\partial x_j} = -\frac{\partial T}{\partial x_i} s_{ij}^* \frac{\partial T}{\partial x_j} - \frac{\partial T}{\partial x_i} \frac{\partial T}{\partial x_i} s_{kk} = P_T^* + P_T^d. \quad (2.77)$$

ここで、 s_{ij}^* を含む項は流体の圧縮・膨張を引き起こさない流体変形による散逸生成項になる。それに対して、 $s_{kk} = \frac{1}{3}\Theta$ を含む P_T^d および P_φ^d は膨張圧縮による流体体積の変化が寄与する散逸生成項である。 s_{ij}^* がソレノイダル条件 ($\Theta = 0$) を満たすひずみ速度テンソルであり、次式のように行列 (s_{ij}^*) の対角成分から s_{kk} を取り除いて得られる。

$$(s_{ij}^*) = (s_{ij}) - s_{kk}\mathbf{I} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} - s_{kk} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y}\right) & \frac{\partial u_y}{\partial y} - s_{kk} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z}\right) & \frac{\partial u_z}{\partial z} - s_{kk} \end{pmatrix}. \quad (2.78)$$

ここで、 \mathbf{I} は単位行列である。図(2.9)に全計算条件における無次元化された P_φ^* , P_φ^d , P_T^* と P_T^d の確率密度 (PDF) 分布を示す。過去の非圧縮性乱流の結果 [61,62] と同じように、 P_φ^* と P_T^* の PDF 分布は正に歪む特性が観察され、 s_{ij}^* の正二負一固有値 [63] のため流体体積が不変の場合における一方向の縮み変形がスカラー散逸率の生成を促進する支配的な要因だとわかった。また、マッハ数の増加に従い P_φ^d と P_T^d の効果が強くなる傾向が見られたが、 P_φ^d と P_T^d が大きいときの PDF の大きさが P_φ^* と P_T^* よりはるかに小さいので、本計算条件では噴流マッハ数と噴流レイノルズ数の変化が散逸生成の統計的な特性に大きく影響しないことがわかった。また、 P_φ^* と P_T^* の PDF が同様の分布を示しており、パッシブスカラー変動と温度変動のスカラー散逸率の生成機構に関連があることがわかる。これらの結果から、分子拡散項のモデリングとして提案された混合体積モデル (MVM) が熱拡散項に対しても有効であることが期待できる。

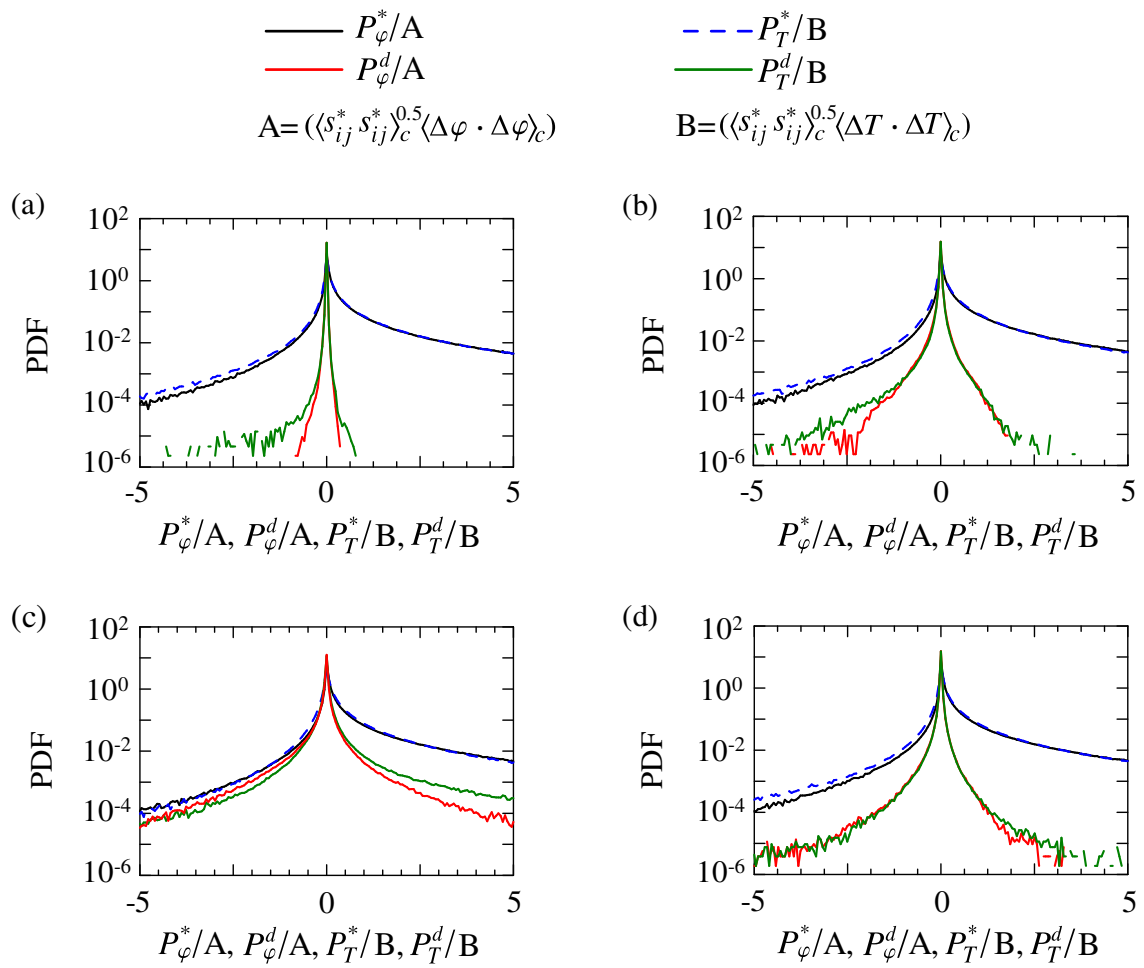


図2.9 スカラー散逸率の生成項のPDF : (a)Run A, (b)Run B, (c)Run C, (d)Run D.

2.6 結言

本章ではパッシブスカラー混合を伴う圧縮性二次元噴流の直接数値計算法 (DNS 法) を行った。噴流レイノルズ数 (14000, 32000) と噴流マッハ数 (0.6, 1.6, 2.6) と組み合わせた4つの計算条件ケースに対して計算が行われた。ここでは DNS データによる主な考察について以下にまとめる。

DNS 法により、乱流が発達した領域における瞬時の温度場とパッシブスカラー場を可視化することで以下のことがわかった。

- 噴流マッハ数の増加に伴い、噴流広がり方向におけるパッシブスカラーの乱流拡散の抑制が強くなる。また、噴流レイノルズ数の増加に伴い、より小さいパッシブスカラー変動構造が増える。
- 噴流マッハ数の増加に伴い、噴流領域内部の温度増加および噴流領域周辺の Jet crackle 構造が顕著になる。また、温度場に対する噴流レイノルズ数の効果はパッシブスカラーと同じになる。

また、速度場、温度場とパッシブスカラー場の統計量の解析をすることで以下のことがわかった。

- 流れ方向速度場とパッシブスカラー場における半値幅の時間変化分布から、乱流が発達している時間帯で半値幅の二乗が線形的に増加することが確認できた。また、噴流マッハ数の増加による半値幅上昇の遅れもパッシブスカラーの乱流拡散の抑制の裏付けである。
- 正規化された平均速度、平均パッシブスカラー、速度 r.m.s. 値とパッシブスカラー r.m.s 値の y 方向分布 (噴流広がり分布) が非圧縮性噴流の実測結果とよく一致していることから、本 DNS 法により計算された圧縮性乱流噴流の自己相似性が確認できた。また、マッハ数の増加による r.m.s. 値の減少が見られた。
- 流体の圧縮性に関連した流体変形と圧縮性には無関係な流体変形によるスカラー (パッシブスカラーと温度) 散逸率の生成項の PDF 分布について、圧縮性は無関係な流体変形分の PDF 形状は正に偏ることから、ソレノイダル条件のひずみ速度テンソルの正二負一固有値^[63]に基づき非圧縮性流体変形のうち compressive strain がスカラー散逸率の生成を促進する支配的な要因だとわかった。圧縮性に関連した流体変形分について、散逸率の生成項が0以外の PDF の大きさがマッハ数の増加とともに増加していくものの、圧縮性は無関係な流体変形分の PDF の大きさに比べるとはるかに小さい。また、パッシブスカラーと温度散逸率の生成項の PDF 分布に強い相似性が見られた。

第3章

陰的LES法による物質混合を伴う圧縮性 二次元噴流の数値計算

3.1 緒言

本章では、圧縮性乱流の混合過程に対する陰的LES法の有効性の検証結果について述べる。節(1.2.2)で説明されているように、陰的LES法は離散化スキームで計算された物理量にローパスフィルターをかけることでSGS成分の散逸効果を果たし、従来の陽的LES法に比べ計算コストやアルゴリズムの使いやすさなどの応用面における優位性を持っている。陰的LES法の物質混合を伴う乱流現象への予測について、現在のところ非圧縮性流体の数値計算にしか適用されていなく、圧縮性流体の数値計算に対する有効性は未だに明らかにされていない。このような陰的LES法を圧縮性流体用のLES-粒子法に実装するために、本章では前章と同じの計算対象を陰的LESで計算し、前章におけるDNSの計算結果と比較することで、物質混合を伴う圧縮性乱流に対する有効性を調査した。また、計算手法について、本陰的LES法の計算スキームは前章の完全陽解スキームから発展されているので、支配方程式、時間積分スキームと空間微分スキームの説明は前章の節(2.2), (2.4.2)と(2.4.1)を参考されたい。計算手法のフィルタリングスキームについて前章のstandardローパスフィルターより格子幅に相当な長さスケールの乱れ構造をもっと適切に扱えるselectiveローパスフィルター及び高速流体の計算安定性を保持するshock-capturingフィルターを詳しく説明する。計算結果について亜音速噴流(噴流マッハ数0.6)と超音速噴流(噴流マッハ数2.6)の自己相似領域に着目した乱流場・混合場の統計的な特性を比較検証したほかに、今までにない格子スケール成分のパッシブスカラー散逸効果とサブ格子スケール(SGS)成分のパッシブスカラー散逸効果をそれぞれ分けて定量化するという新たな統計解析をすることで、陰的LES法の計算格子数の違いによる二成分の全体のパッシブスカラー散逸機構に対する寄与度の変化を調査した。

3.2 計算手法

3.2.1 Selective フィルター

本陰的 LES 法では，内部領域と y 方向境界付近における SGS 成分の変動に対する散逸効果はそれぞれ 11 点中心的な selective フィルター^[64]と 2.4.3 節の式 (2.65-2.68) で提供されている． x と z 方向境界が周期境界なので， x と z 方向境界付近にも 11 点中心的な selective フィルターが利用できる．内部領域では，11 点中心的な selective フィルターは x 方向， z 方向， y 方向という順番で逐次的に五段階四次精度ルンゲクッタ法にアップデートされた変数 $f_{i,j,k}(\rho, \rho u, \rho T, \rho \varphi)$ にかけている．例として， $f_{i,j,k}$ を x 方向のフィルタリングは以下の式で表される．

$$F_x * f_{i,j,k} \equiv f_{i,j,k} - \underbrace{\sum_{n=-5}^5 d_n f_{i+n,j,k}}_{D_f(i,j,k)} \quad (3.1)$$

ここで， F_x は x 方向における Selective フィルターを指す．2.4.3 節の式 (2.70) も上式のように表現できるが，係数 d_n について陰的 LES 法と DNS 法の値が以下の表に示されたように異なる．

表 3.1 DNS 法と陰的 LES 法のフィルター係数 ($d_{-n} = d_n$).

| | DNS 法 | 陰的 LES 法 |
|-------|----------|-----------------|
| d_0 | 63/256 | 0.215044884112 |
| d_1 | -105/512 | -0.187772883589 |
| d_2 | 15/128 | 0.123755948787 |
| d_3 | -45/1024 | -0.123755948787 |
| d_4 | 5/512 | 0.018721609157 |
| d_5 | -1/1024 | -0.002999540835 |

DNS 法に使ったフィルターは Standard 十次精度フィルターとも呼ばれる．Standard 十次精度フィルター係数は $k\Delta x \rightarrow 0$ における減衰関数 $D_f(i, j, k)$ のテイラー級数の項が消えるように定められている^[65]． k は波数である．陰的 LES 法用の Selective フィルター係数は次式の積分関数を最小化することで得られた．

$$\int_{\ln(\pi/16)}^{\ln(\pi/2)} D_k(k\Delta x) d(\ln(k\Delta x)), \quad \text{with } D_k(k\Delta x) = d_0 + \sum_{n=1}^N 2d_n \cos(nk\Delta x). \quad (3.2)$$

ここで、減衰関数 $D_k(k\Delta x)$ は $D_f(i, j, k)$ からフーリエ変換されて得られた。波数空間における両フィルターの違いを調べるために、図(3.1)では波数 k に対する減衰関数 $D_k(k\Delta x)$ の log-log プロットが示されている。Selective フィルターは Standard 十次精度フィルターと同様な散逸効果で $k\Delta x \geq \pi$ の波を完全に除去することができるが、 $k\Delta x \approx \pi/2$ 、すなわち波長が約4倍の格子幅の短い波にかけた Selective フィルターの数値散逸効果が Standard 十次精度フィルターより弱くなる。また $k\Delta x \approx \pi/8$ における Selective フィルターの $D_k(k\Delta x)$ が Standard 十次精度フィルターより大きく上回っているが、短い波に対する減衰関数の大きさと比較すればかなり低いオーダーの値になっている。総じて、この図からサブ格子スケールの波には同じ強さの数値粘性で完全に除去されたが、Selective フィルターが4倍の格子幅ぐらいを長さとする波にかけた数値粘性が Standard フィルターより明らかに小さいことで、Selective フィルターを組み込んだ離散化スキームが格子で解像可能な短い波をより適切に扱うことができ、特に LES 用の粗い格子領域ではより高い計算精度が得られることがわかった。

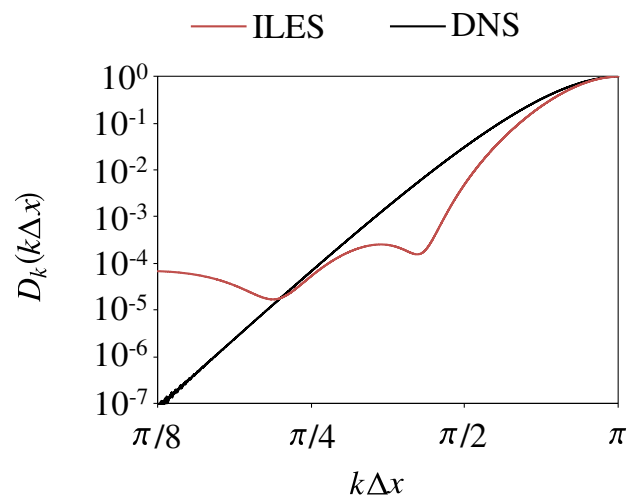


図 3.1 減衰関数 $D_k(k\Delta x)$ の波数分布。

3.2.2 Shock capturing フィルター

高速流れ、特に超音速流れ中では不連続的な波構造が伝播する。この不連続構造は数値シミュレーションでは連続体近似として扱われているため、不連続となる格子点付近における瞬間の流れ場が大きく振動してしまい、その振動幅は物理的な不連続構造による振動幅を超過する。このような非物理的振動をギブス振動という。格子幅が大きくなるとギブス振動が強くなるので、強い dilatation を含む点付近に特別な人工粘性を付加する必要がある。本計算では、ギブス振動による数値的な不安定性の対策として Bogey らによって提案された Shock capturing フィルタースキーム^[66]を3方向で逐次的に Selective フィルターに更新された変数 $f_{i,j,k}(\rho, \rho u, \rho T, \rho \varphi)$ にかける。Shock capturing フィルタースキームは保存型フィルターとショックセンサーからなり、例として保存型フィルター F_x^S による $f_{i,j,k}$ のフィルタリングは以下の式で表される。

$$F_x^{(S)} * f_{i,j,k} \equiv f_{i,j,k} - \left[-0.5 \left(\sigma_{i-1,j,k}^{(x)} + \sigma_{i,j,k}^{(x)} \right) \left(-d_1^{(S)} f_{i-2,j,k} + d_2^{(S)} f_{i-1,j,k} - d_2^{(S)} f_{i,j,k} + d_1^{(S)} f_{i+1,j,k} \right) \right. \\ \left. + 0.5 \left(\sigma_{i,j,k}^{(x)} + \sigma_{i+1,j,k}^{(x)} \right) \left(-d_1^{(S)} f_{i-1,j,k} + d_2^{(S)} f_{i,j,k} - d_2^{(S)} f_{i+1,j,k} + d_1^{(S)} f_{i+2,j,k} \right) \right]. \quad (3.3)$$

ここで、フィルター係数 $d_1^{(S)}$ と $d_2^{(S)}$ をそれぞれ 0.039617 と 0.210383 にする。フィルター strength $\sigma^{(x)}$ は次式のように動的に決められている。

$$\sigma^{(x)} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{r_m}{r^{(x)}} + \left| 1 - \frac{r_m}{r^{(x)}} \right| \right). \quad (3.4)$$

ここで、 r_m は閾値パラメーターであり、ショックセンサーインデックス $r^{(x)}$ は x 方向における不連続な波の強さを表す。上式により、 $r^{(x)} < r_m$ となる格子点における $\sigma^{(x)}$ が 0 なので、実質的にはフィルターをかけていないことと同じである。一方、 $r^{(x)} \geq r_m$ 、すなわち強い不連続な波を含む格子点に関しては、その格子点だけにフィルターをかけることが可能となる。 $r^{(x)}$ は dilatation $\Theta \equiv \partial u_j / \partial x_j$ により定量化されている。したがって、次式のように $r^{(x)}$ は各格子における瞬間局所音速 $c = \sqrt{\gamma P / \rho}$ と Θ の高周波数成分 D により算出される。

$$r_{i,j,k}^{(x)} = \frac{0.5 \left[(D_{i,j,k} - D_{i+1,j,k})^2 + (D_{i,j,k} - D_{i-1,j,k})^2 \right]}{c_{i,j,k}^2 / (\Delta x)^2} + 10^{-16}. \quad (3.5)$$

$$D_{i,j,k} = \frac{1}{4} \left(-\Theta_{i-1,j,k} + 2\Theta_{i,j,k} - \Theta_{i+1,j,k} \right). \quad (3.6)$$

このように、一定な閾値パラメーター r_m は乱流変動と不連続な波によるギブス振動を識別することにあたって重要な役割を担っている。その決め方について後述する。

3.3 計算条件の設定

本陰的 LES 法の計算条件は前章の Run A と Run C と同じような 2 つのケースで設定されている。ただし、LES 法の格子サイズの設定がコルモゴロフスケールに制約されることなく、大スケールだけの渦に対する直接計算のため LES 格子をある程度粗くする必要がある。よって、本陰的 LES 法における計算格子数 (N_x, N_y, N_z) はコルモゴロフスケールの 5 倍以上の渦スケールが解像できるように (480, 300, 240) とされている。本陰的 LES 法の解像度への依存性を調査するため、 x と z 方向における格子数を 0.75 倍まで下げて、(360, 300, 180) の計算格子数で噴流マッハ数 0.6 と 2.6 の計算も行った。

前節で説明された Shock capturing フィルターにおける閾値パラメーター r_m は図 (3.2) により決められる。 $r_m \geq 10^1$ における陰的 LES シミュレーションが乱流が発達する前に破綻してしまうため、図 (3.2) には r_m の値の範囲を 10^{-6} から 10^0 まで取った。また、時間発展型圧縮性噴流では dilatation の強い時期が乱流へ遷移している時期および自己相似領域の初期段階の時期なので、図 (3.2) に $t = 12$ (黒丸) と $t = 18$ (赤丸) の計算結果が載せられている。 $r_m \leq 10^{-3}$ において $\langle \varphi \rangle$ が減少しており、 φ_{rms} が増加している傾向が見られた。この場合、Shock capturing フィルターの過大な散逸効果が乱流遷移過程まで及ぶことにより $\langle \varphi \rangle$ の減衰の非物理的な遅れ及び φ_{rms} の非物理的な減衰が生じてしまう。これらを回避するため、 $\langle \varphi \rangle$ と φ_{rms} が r_m に依存せずほぼ一定となる $r_m = 1$ と設定した。

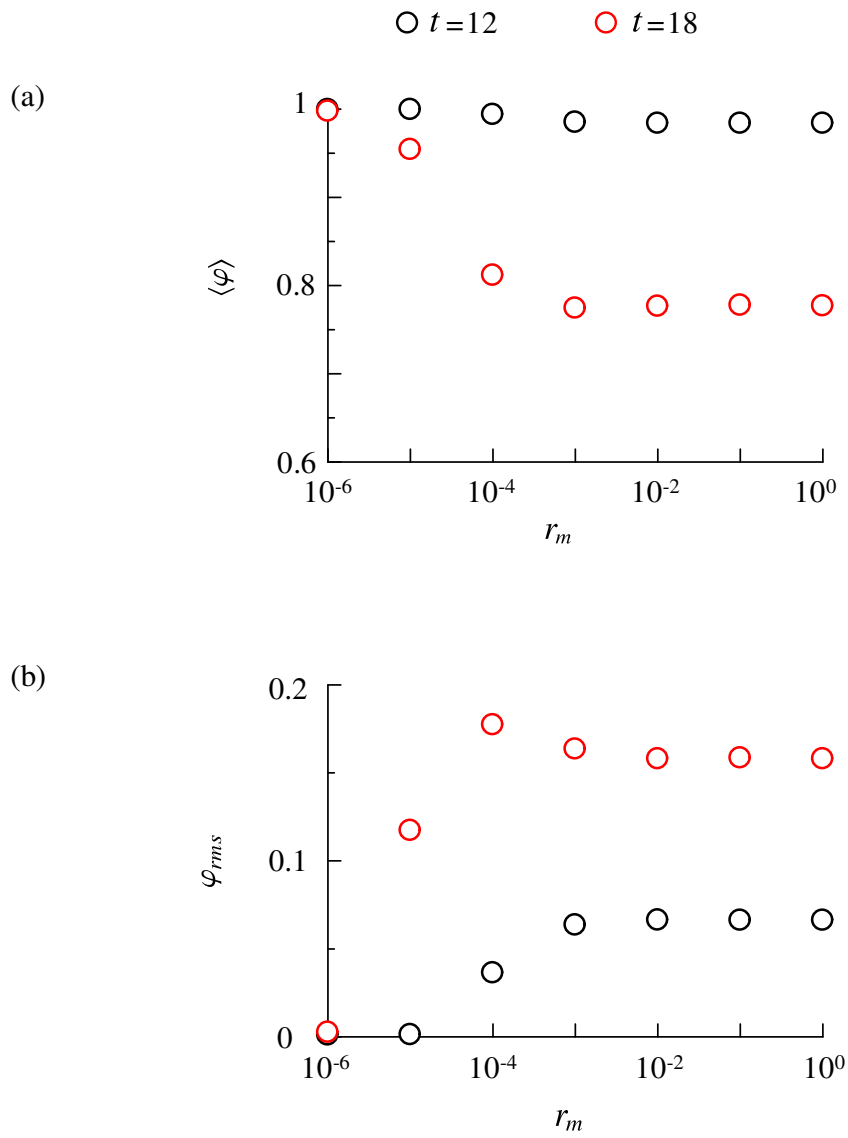


図3.2 噴流マッハ数2.6の噴流中心面における平均パッシブスカラー $\langle \varphi \rangle$: (a)とパッシブスカラー r.m.s. 値 φ_{rms} (b)の r_m への依存性.

3.4 計算結果

3.4.1 乱流への時間発展過程の可視化

図(3.3)と(3.4)では5つの計算時間の x - y 平面における瞬間流れ方向速度 u_x とパッシブスカラー φ を可視化した。噴流の両端におけるせん断層の不安定性により乱流が形成される。計算時間の経過に伴い、全噴流領域内に現れた小スケールの変動構造が y 方向に発展していく。図(3.3)(a)における計算時間 $t = 6$ と (b)における計算時間 $t = 6$ の可視化結果を比較することから、噴流マッハ数の増加がせん断層における初期乱流遷移を遅らせることが確認された。図(3.3)(a)における計算時間 $t = 6$ の可視化図では噴流の両端に周囲流を噴流領域内に巻き込む大スケールの渦構造(図中の緑の丸線)が観察されたが、図(3.3)(b)における計算時間 $t = 6$ の可視化図にはこのような構造が見られなかった。これと似たようなマッハ数の効果は過去の混合層に対する実験的な研究においても確認されている^[60,67]。図(3.3)(b)の計算時間 $t = 12, 22, 26$ の周囲流領域(青い領域)でシャープな速度ジャンプ構造が現れ、噴流内部から伝播された圧力波が確認できた。特に $t = 12$ における初期段階のせん断層から圧力波が斜めに伝播されていく様子がわかる。図(3.3)(b)における速度ジャンプ構造の形から、Shock capturing フィルターを用いた本陰的 LES 法により強い圧力波を適切に捉えることができることが確認された。図(3.4)より計算時間が進むにつれて周囲流と噴流のパッシブスカラー φ が混合されることで初期状態の真赤がだんだん消えていく。乱流が発達している $t = 26$ における図(3.4)(a)と(b)を比較すると、噴流マッハ数の低い方の噴流中心の色がより青いので、噴流マッハ数が低くなると初期状態の $\varphi = 1$ と $\varphi = 0$ の混合速度が速くなる。このような傾向も前章の DNS 結果に見られている。

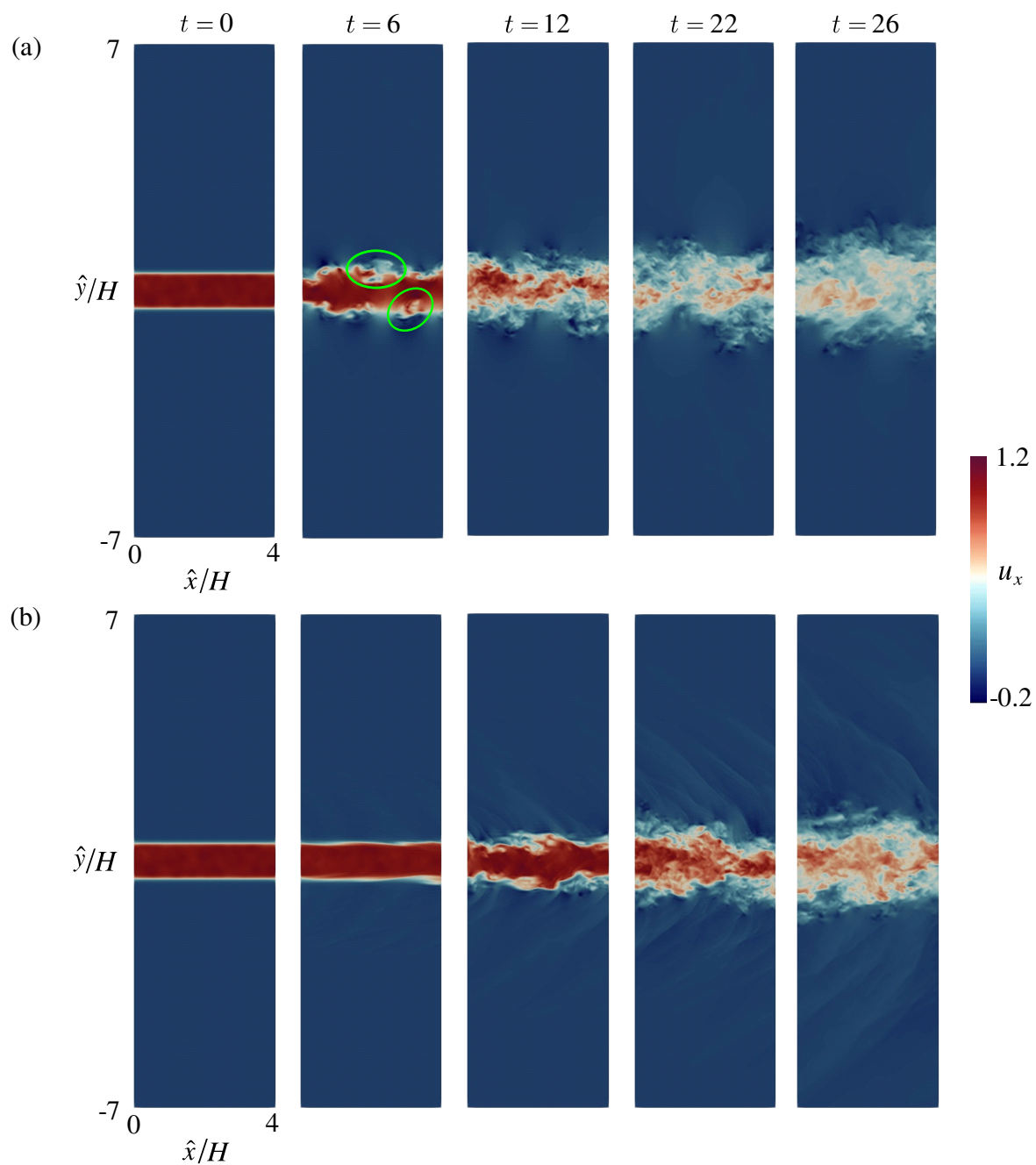


図3.3 x - y 平面における瞬間流れ方向速度場の可視化：(a) $M_J = 0.6$, (b) $M_J = 2.6$.

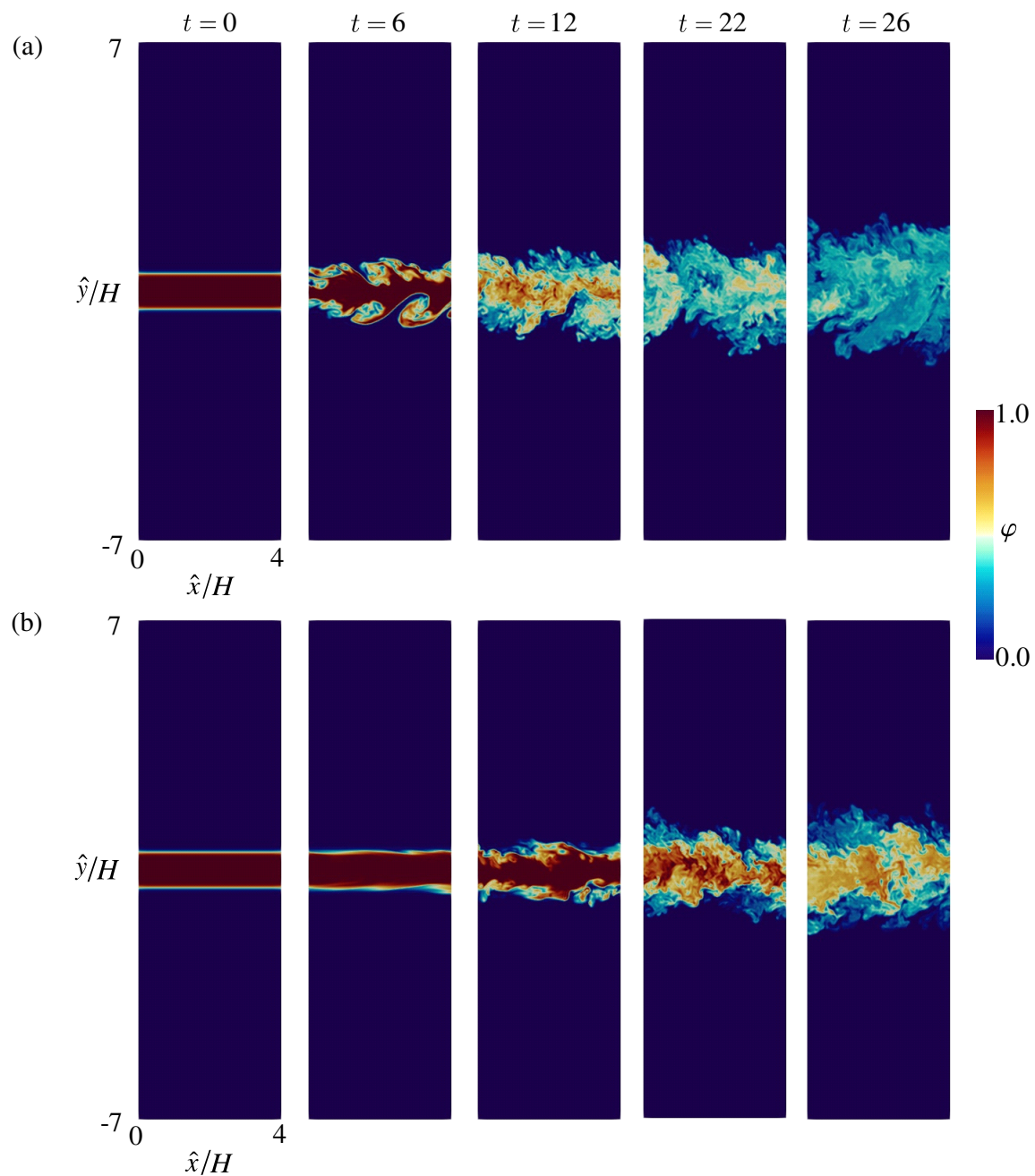


図 3.4 x - y 平面における瞬間パッシブスカラー場の可視化 : (a) $M_J = 0.6$, (b) $M_J = 2.6$.

流れ方向平均速度場と平均パッシブスカラー場における噴流半値幅 b_u と b_φ の計算時間に対する分布を図 (3.5) に示す。ここで陰的 LES 法の計算結果と前章 DNS 法の計算結果を比較する。ポテンシャルコア領域における一定の半値幅分布と自己相似領域における線形的な増加分布のマッハ数による影響について陰的 LES 法の計算結果は前章で示した DNS 法の計算結果とよく一致した。

図 (3.6) に噴流中心における平均値で正規された計算時間 6 と 26 の平均場の y 方向分布を示す。マッハ数 0.6 の計算時間 6 と 26 における分布は相似であるが、高マッハ数による噴流発展の遅れによりマッハ数 2.6 の計算時間 6 における分布はトップハットに近い形をしている。計算時間 26 における両マッハ数の分布が単一の曲線に漸近している。図 (3.5) と (3.6) で陰的 LES 法の計算結果が前章 DNS 法の計算結果とよく一致したことから、陰的 LES 法が平均速度場と平均パッシブスカラー場の時間発展過程を正確に予測できることがわかった。

— ILES ($M_J = 0.6$) - - - ILES ($M_J = 2.6$) ○ DNS ($M_J = 0.6$) ▽ DNS ($M_J = 2.6$)

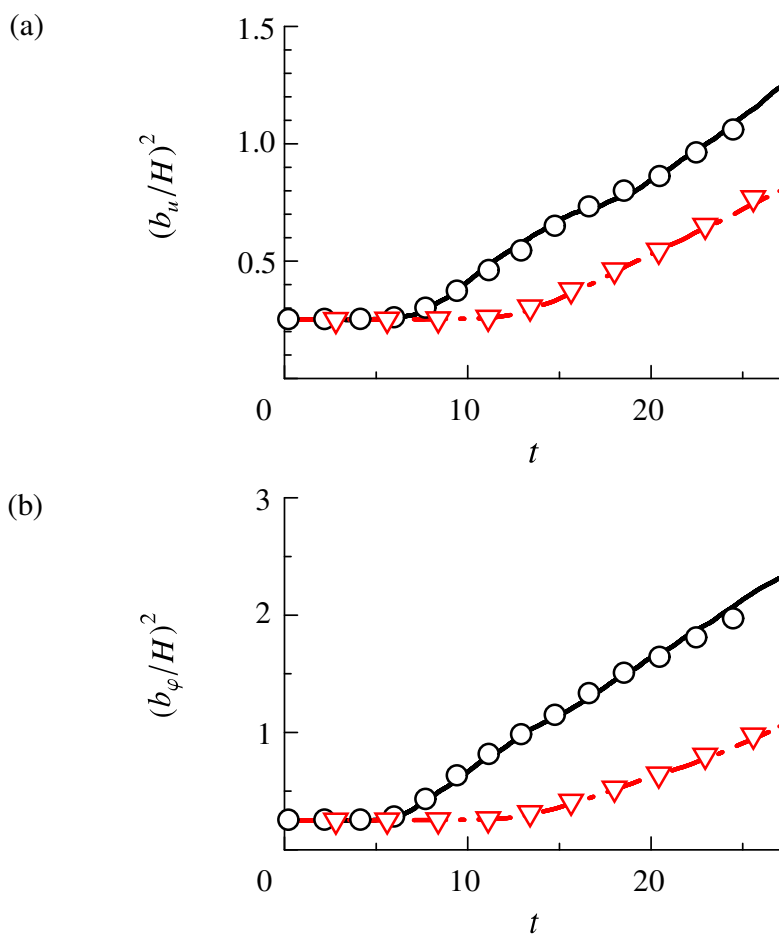


図 3.5 (a) 流れ方向平均速度場と (b) 平均パッシブスカラー場における噴流半値幅の自乗の時間推移.

ILES: $t=6$ — $M_J=0.6$ - - $M_J=2.6$ $t=26$ — $M_J=0.6$ — $M_J=2.6$
 DNS: $t=6$ ○ $M_J=0.6$ ○ $M_J=2.6$ $t=26$ △ $M_J=0.6$ △ $M_J=2.6$

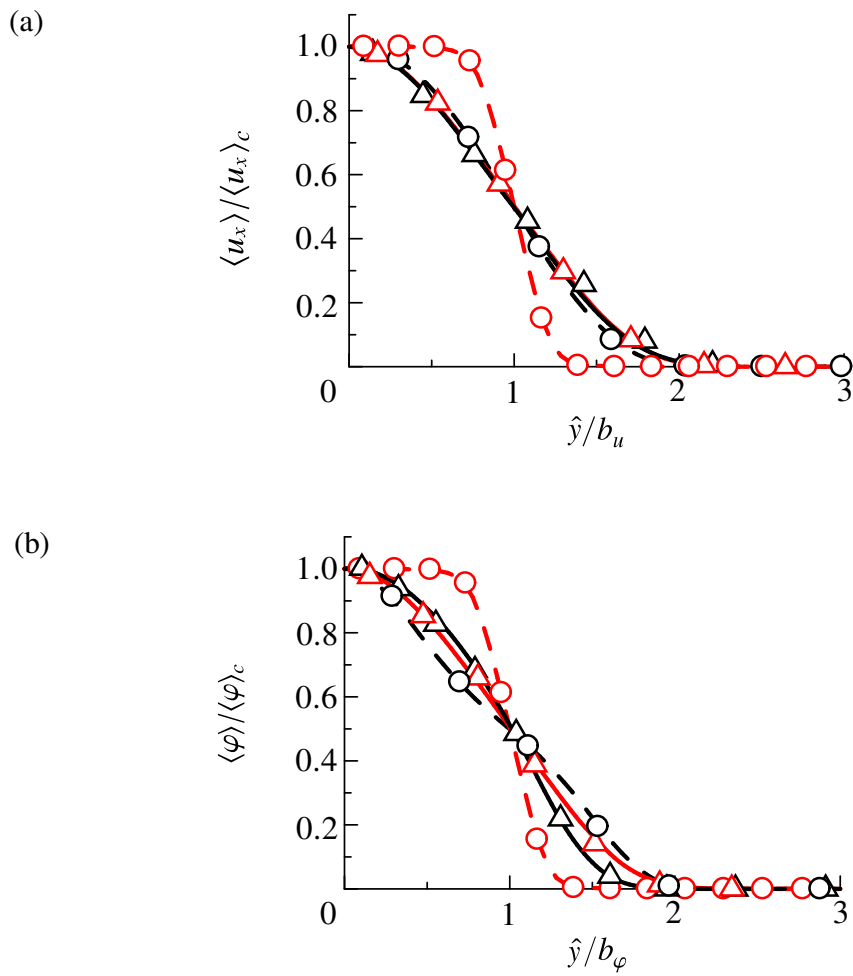


図3.6 (a) 流れ方向平均速度と (b) 平均パッシブスカラーの y 方向分布. 縦軸の値はそれぞれ噴流半値幅で正規化されており, 横軸の値はそれぞれ噴流中心 $y = 0$ における平均値で正規化されている.

3.4.2 自己相似領域における乱流・パッシブスカラー混合の統計的な特性

図(3.7)に計算時間 $t = 26$ における正規化された変動 r.m.s. 値の y 方向分布を示す. 陰的 LES による結果が DNS 法の計算結果と一致したことから, 噴流マッハ数の増加による速度変動の r.m.s. とパッシブスカラー変動の r.m.s. の減少が陰的 LES 法により適切に予測できることが確認された. 陰的 LES 法によるパッシブスカラー場の予測に対するさらなる検証として, $y = 0$ と $y = b_\varphi$ におけるパッシブスカラー φ の PDF 分布を図(3.8)に示す. 噴流中心の PDF 分布は単一のピークを有するが, $y = b_\varphi$ では二峰性の分布をしており, 噴流の外部間欠性のため $\varphi = 0$ において高いピークを持つ分布となる. DNS 法の計算結果と比較すると, この2種類の PDF 分布形状が陰的 LES 法により精度よく予測されていることがわかる. 図(3.4)に見られた高マッハ数による周囲流パッシブスカラー $\varphi = 0$ の巻き込みの抑制効果もマッハ数 0.6 と 2.6 の $\varphi = 0$ における PDF の違いに反映された. このような PDF に対するマッハ数の効果も陰的 LES 法により高精度で計算可能であることがわかった.

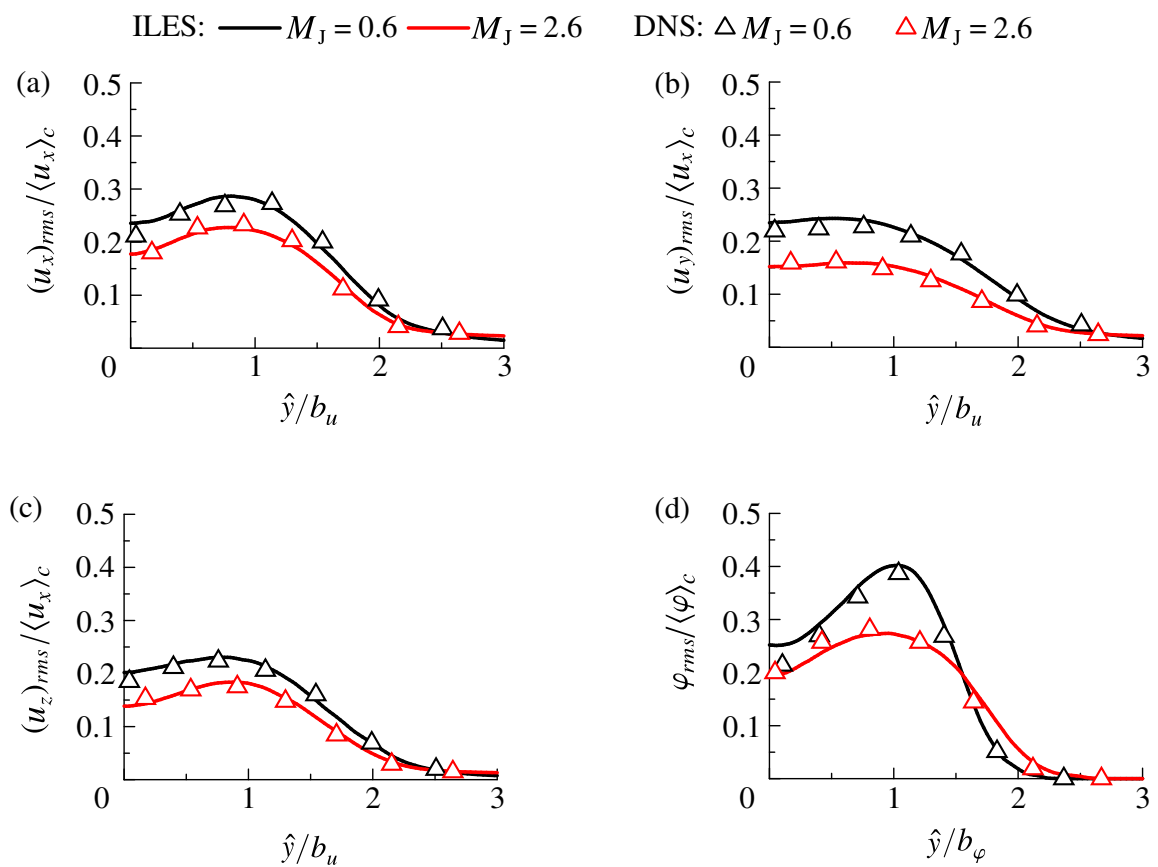


図 3.7 (a) 流れ方向速度変動の r.m.s. 値, (b) 噴流横断方向速度変動の r.m.s. 値, (c) スパン方向速度変動の r.m.s. 値と (d) パッシブスカラー変動の r.m.s. 値の y 方向分布. 縦軸の値はそれぞれ噴流の半値幅で正規化されており, 横軸の値はそれぞれ噴流中心 $y = 0$ における平均値で正規化されている.

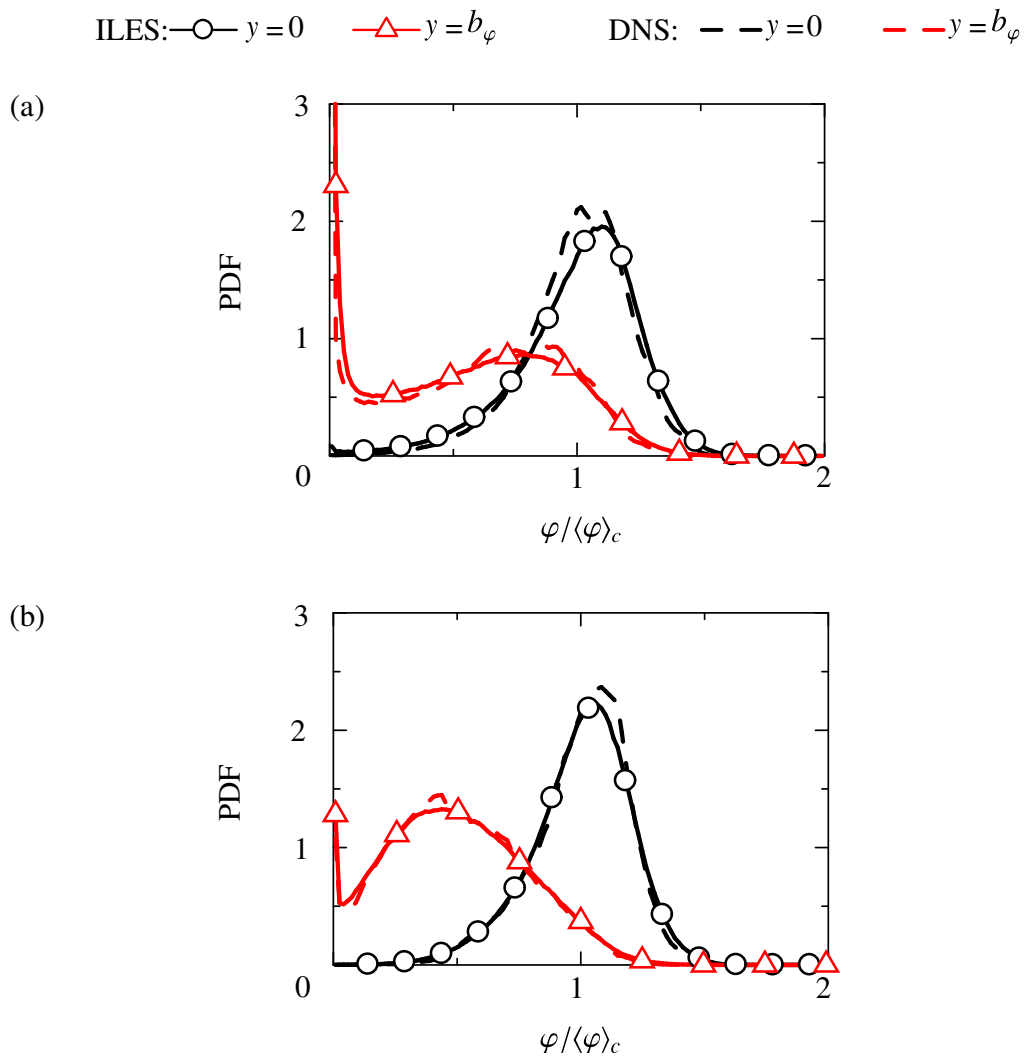


図 3.8 (a) 噴流マッハ数 0.6 と噴流マッハ数 2.6 におけるパッシブスカラー φ の PDF.

平均スカラーの時間発展過程はパッシブスカラーフラックス $\langle \rho u'_y \phi' \rangle$ に支配される。図 (3.9) に計算時間 18 と 26 における $\langle \rho u'_y \phi' \rangle$ の y 方向分布を示す。高マッハ数による噴流発展の抑制のため、マッハ数 2.6 の分布では正と負のピークに対する y 方向位置がより噴流中心に近くなる。また、この図で陰的 LES 法と DNS 法が一致したことからも平均パッシブスカラー場に対する適切な予測が確認できる。陰的 LES 法の格子幅への依存性を調査するために、2 ケースの格子を用いて計算された $\langle u_x \rangle$, $(u_x)_{rms}$, $\langle \phi \rangle$, と ϕ_{rms} の計算時間 $t = 26$ における y 方向分布を図 (3.10) に示す。ここで、fine grid が格子数 (480, 300, 240) であり、coarse grid が格子数 (360, 300, 180) である。これらの統計量が格子幅にあまり依存しないことが観察された。また、 $\langle u_x \rangle$ と $(u_x)_{rms}$ が大スケールの乱流特性に深く関わり、 $\langle \phi \rangle$ と ϕ_{rms} が流れ中のパッシブスカラー場における大スケール特性に深く関わるので、このような考察結果から噴流の発達した乱流領域における大スケールのパッシブスカラー変動構造と速度変動構造をこの 2 ケースで設定された格子領域で精度よくとらえることができることが確認された。ただし、巨視的な乱流混合特性の統計量を高精度に解析するには、 x と z 方向における格子幅がコルモゴロフスケールより 2 桁以上大きくしないように格子数を設定することを注意されたい。

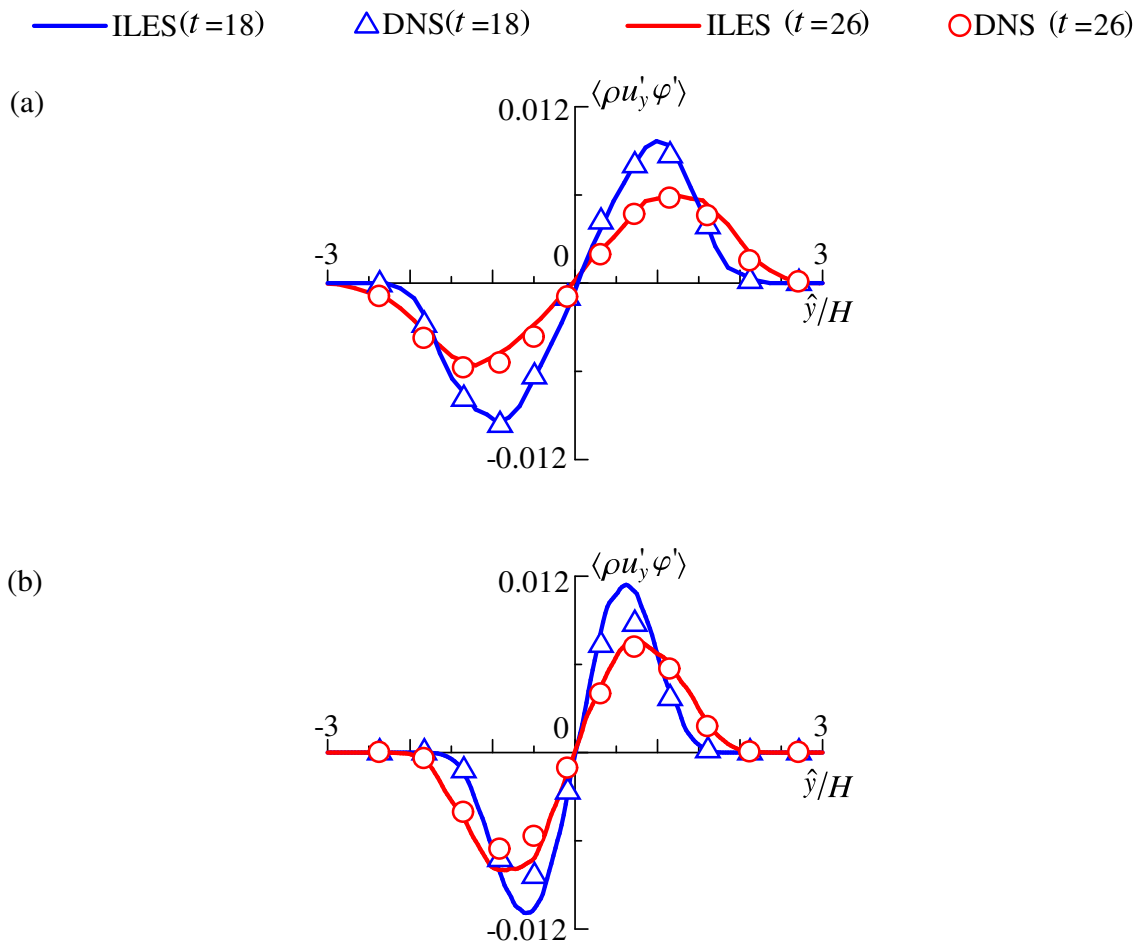


図3.9 (a)噴流マッハ数0.6と噴流マッハ数2.6におけるパッシブスカラーフラックス $\langle \rho u'_y \varphi' \rangle$ の y 方向分布.

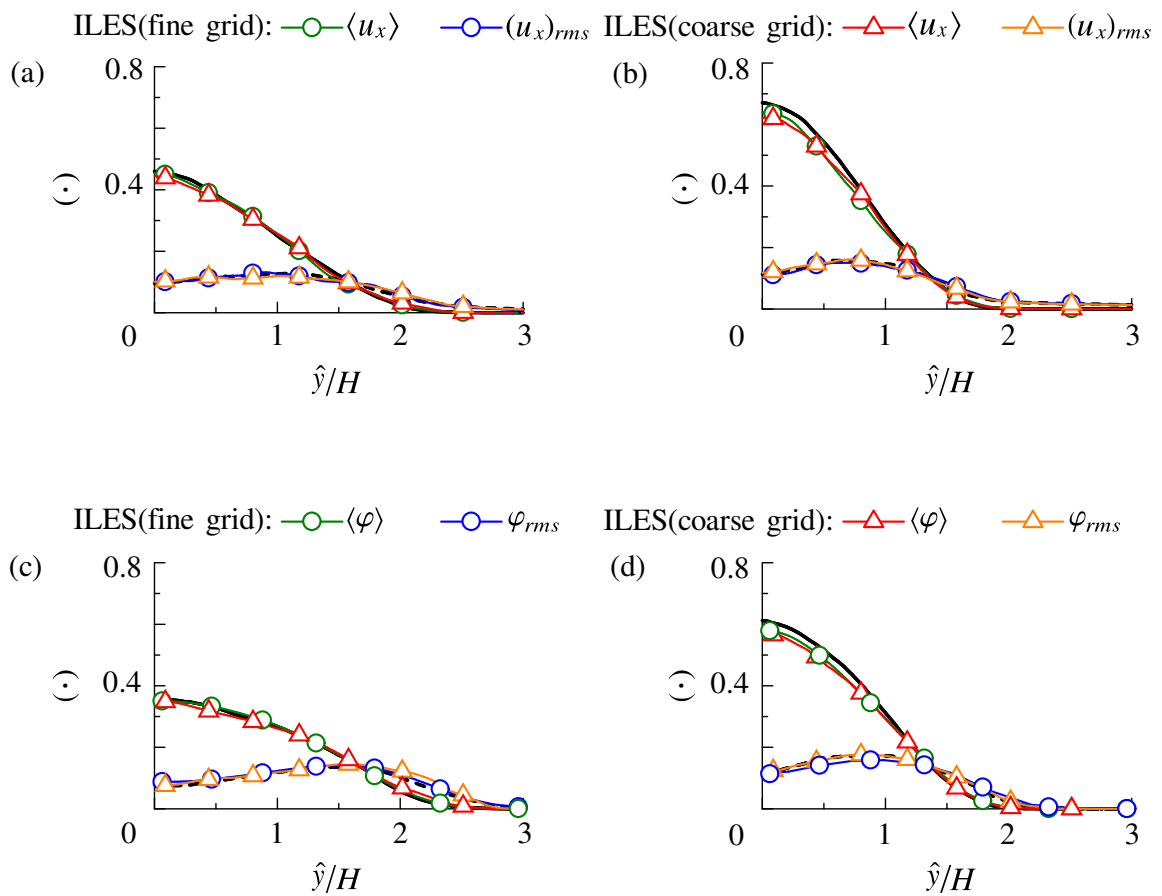


図 3.10 (a) 噴流マッハ数 0.6 と (b) 噴流マッハ数 2.6 における流れ方向平均速度 $\langle u_x \rangle$ と主流方向速度変動の r.m.s. 値 $(u_x)_{rms}$ の陰的 LES 法の格子幅への依存性と (c) 噴流マッハ数 0.6 と (d) 噴流マッハ数 2.6 における平均パッシブスカラー $\langle \varphi \rangle$ とパッシブスカラー変動の r.m.s. 値 φ_{rms} の陰的 LES 法の格子幅への依存性。

3.4.3 乱流エネルギーおよびスカラーバリエーションに対するフィルタリングの寄与

本節では、乱流エネルギーとパッシブスカラーバリエーションに対するフィルターの寄与について述べる。圧縮性流れ中の乱流エネルギーとパッシブスカラーバリエーションは一般的にファール平均 $[f] = \langle \rho f \rangle / \langle \rho \rangle$ を使い $\langle \rho u_k'' u_k'' \rangle = \langle \rho \rangle [u_k'' u_k'']$ と $\langle \rho \varphi''^2 \rangle = \langle \rho \rangle [\varphi''^2]$ のように計算される。ここで、 $[f]$ に対する f の変動は $f'' = f - [f]$ で計算される。本陰的 LES 法では、Selective フィルターと Shock capturing フィルターをまとめて乱流エネルギーとパッシブスカラーバリエーションを散逸するための陰的 SGS モデルとする。以下、 \bar{f} は変数 f から陰的 SGS モデルで処理された変数である。この陰的 SGS モデルの寄与を表す項 F は次式で表現される。

$$F(f) = \frac{1}{\Delta t} (\bar{f} - f). \quad (3.7)$$

項 F を密度 ρ と $\rho\varphi$ の支配方程式に代入すると、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = F(\rho), \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varphi u_j}{\partial x_j} = \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) + \varphi \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{ScRe} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) + F(\rho \varphi). \quad (3.9)$$

ここで、 $\rho\varphi$ の移流項は非保存型に書き換えられている。式 (3.9) に $2\varphi''$ をかけ、式 (3.8) を代入し、さらに式 (3.9) の両辺を平均化処理することにより次式が得られる。

$$\underbrace{2 \left\langle \rho \varphi'' \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right\rangle}_A + \underbrace{2 \left\langle \rho \varphi'' u_j \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right\rangle}_B = \underbrace{2 \frac{1}{ScRe} \left\langle \varphi'' \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) \right\rangle}_C + 2 \langle \varphi'' F(\rho \varphi) \rangle - 2 \langle \varphi'' \varphi F(\rho) \rangle. \quad (3.10)$$

項 A と B は次のように書き換えられる。

$$A = 2 \langle \rho \varphi'' \rangle \frac{\partial [\varphi]}{\partial t} + \left\langle \frac{\partial \rho \varphi''^2}{\partial t} \right\rangle - \left\langle \varphi''^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \rho \varphi''^2}{\partial t} \right\rangle - \left\langle \varphi''^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle, \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} B &= 2 \langle \rho \varphi'' \rangle [u_j] \frac{\partial [\varphi]}{\partial x_j} + 2 \langle \rho \varphi'' u_j' \rangle \frac{\partial [\varphi]}{\partial x_j} + 2 \left\langle \rho \varphi'' u_j \frac{\partial \varphi''}{\partial x_j} \right\rangle \\ &= 2 \langle \rho \varphi'' u_j' \rangle \frac{\partial [\varphi]}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho u_j \varphi''^2 \rangle - \left\langle \varphi''^2 \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \right\rangle \end{aligned}$$

$$= 2 \langle \rho \varphi'' u_j'' \rangle \frac{\partial [\varphi]}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \rho \varphi''^2 \rangle [u_j]}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho u_j'' \varphi''^2 \rangle - \left\langle \varphi''^2 \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \right\rangle.$$

ここで、 $\langle \rho \varphi'' \rangle = \langle \rho \varphi \rangle - \langle \rho \rangle [\varphi] = 0$ に注意されたい。また項 C は次のように書き換えられる。

$$C = \frac{2}{ScRe} \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu \varphi'' \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}) \right\rangle - \frac{2}{ScRe} \left\langle \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi''}{\partial x_j} \right\rangle. \quad (3.12)$$

式 (3.10)-(3.12) により、パッシブスカラーバリエーションの支配方程式は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \rho \varphi''^2 \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle \rho \varphi''^2 \rangle [u_j]}{\partial x_j} &= -2 \langle \rho \varphi'' u_j'' \rangle \frac{\partial [\varphi]}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho u_j'' \varphi''^2 \rangle + \frac{2}{ScRe} \left\langle \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu \varphi'' \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}) \right\rangle \\ &\quad - \frac{2}{ScRe} \left\langle \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi''}{\partial x_j} \right\rangle - \langle -\varphi''^2 F(\rho) \rangle - 2 \langle \varphi'' F(\rho \varphi) \rangle + 2 \langle \varphi'' \varphi F(\rho) \rangle. \end{aligned}$$

上式の右辺の 4 番目と 5 番目の項はそれぞれ格子スケール (GS) とサブ格子スケール (SGS) における散逸項である。このように、 GS と SGS による瞬間パッシブスカラーバリエーション散逸率 $\epsilon_\varphi^{(GS)}$ と $\epsilon_\varphi^{(SGS)}$ は次のように計算される。

$$\epsilon_\varphi^{(GS)} = \frac{2}{ScRe} \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi''}{\partial x_j}, \quad (3.13)$$

$$\epsilon_\varphi^{(SGS)} = -\varphi''^2 F(\rho) - 2\varphi'' F(\rho \varphi) + 2\varphi'' \varphi F(\rho). \quad (3.14)$$

乱流エネルギーについては、スケール (GS) とサブ格子スケール (SGS) による瞬間散逸率はそれぞれ $\epsilon_k^{(GS)}$ と $\epsilon_k^{(SGS)}$ である。これらの項の平均値は $\langle \rho u_k'' u_k'' \rangle$ の支配方程式に現れる。 $\epsilon_\varphi^{(GS)}$ と $\epsilon_\varphi^{(SGS)}$ と同様に、 $\langle \rho u_k'' u_k'' \rangle$ の支配方程式は ρ と ρu_i の支配方程式から導出されている。導出過程の詳細は過去の文献^[68]を参考されたい。 $\epsilon_k^{(GS)}$ と $\epsilon_k^{(SGS)}$ は次のように求められる。

$$\epsilon_k^{(GS)} = \frac{1}{Re} \tau_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j}, \quad (3.15)$$

$$\epsilon_k^{(SGS)} = -u_i'' F(\rho u_i) + u_i'' u_i F(\rho) - \frac{1}{2} u_i''^2 F(\rho). \quad (3.16)$$

ただし、DNS 法の計算結果で乱流エネルギーとパッシブスカラーバリエーションを解析する

際に、物理的に存在するすべてのスケールの変動構造が格子で解像できるため、DNS データによる散逸率は $\epsilon_k = \epsilon_k^{(GS)}$ and $\epsilon_\varphi = \epsilon_\varphi^{(GS)}$ と定義される。

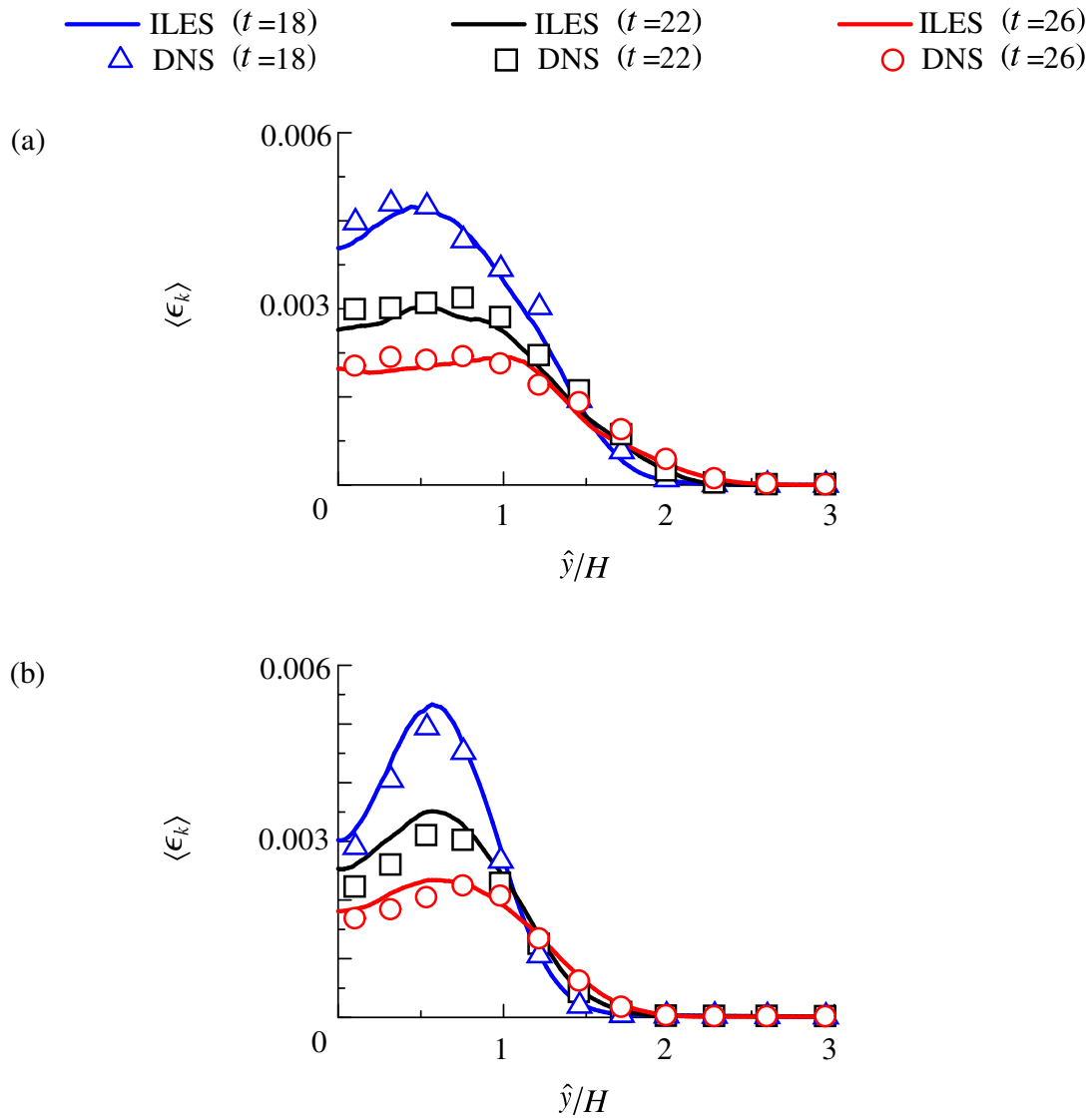


図 3.11 (a) 噴流マッハ数 0.6 と (b) 噴流マッハ数 2.6 における平均乱流エネルギー散逸率 $\langle \epsilon_k \rangle$ の y 方向分布.

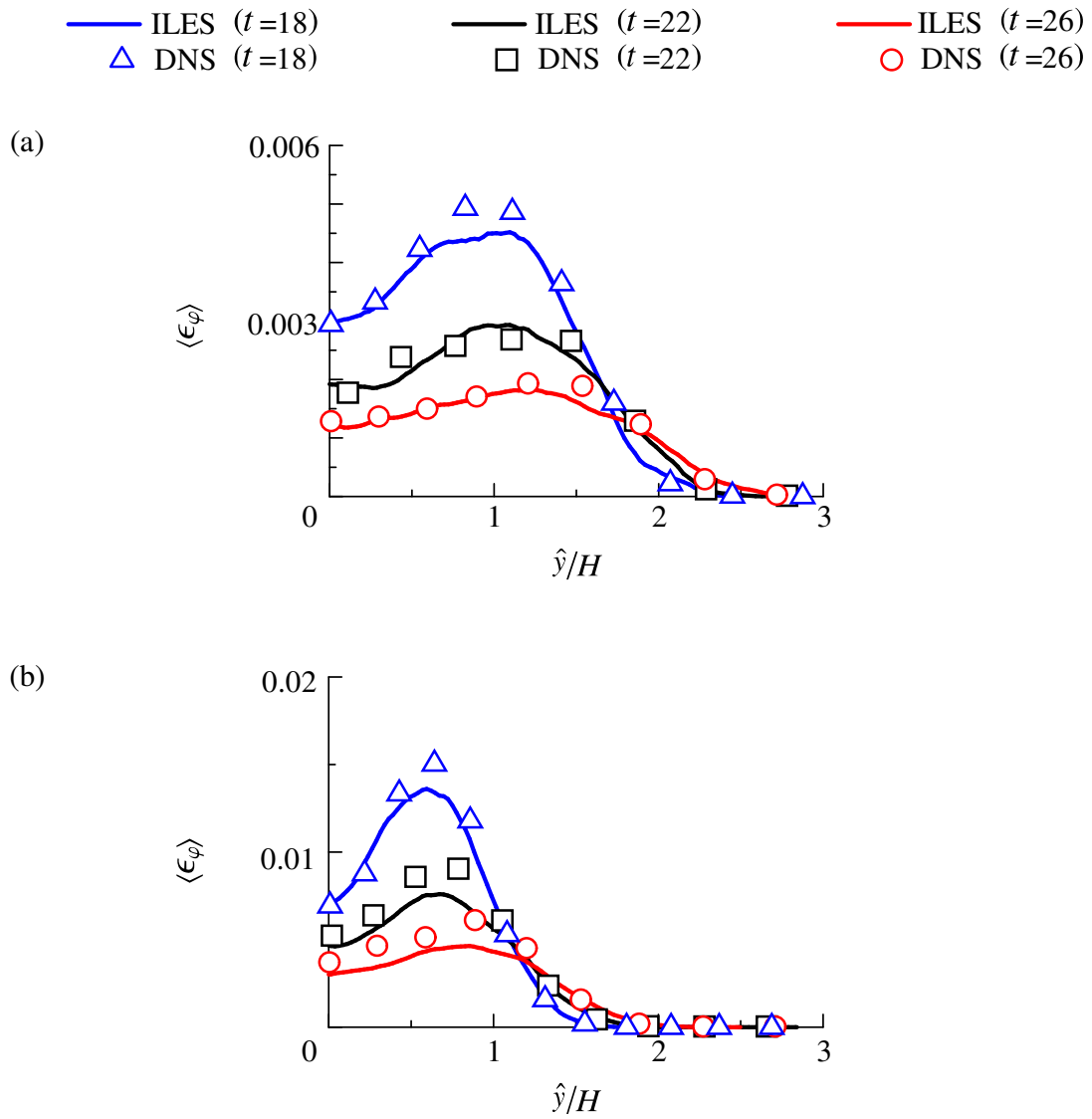


図 3.12 (a) 噴流マッハ数 0.6 と (b) 噴流マッハ数 2.6 における平均パッシブスカラーバリエーション散逸率 $\langle \epsilon_\varphi \rangle$ の y 方向分布.

図(3.11)と(3.12)に乱流エネルギーとパッシブスカラーバリエーションの平均散逸率の y 方向分布を示す. 全スケールにおける散逸率は $\epsilon_k = \epsilon_k^{(GS)} + \epsilon_k^{(SGS)}$ と $\epsilon_\varphi = \epsilon_\varphi^{(GS)} + \epsilon_\varphi^{(SGS)}$ で求められる. マッハ数に関わらず陰的 LES 法の ϵ_k と ϵ_φ のプロットは DNS 法の計算結果とよく一致している. このことから, 平均散逸率の予測に対して陰的 SGS モデルが正確に寄与していることがわかる. 図(3.13)と(3.14)では計算時間 22 における ϵ_k , $\epsilon_k^{(GS)}$, $\epsilon_k^{(SGS)}$ と ϵ_φ , $\epsilon_\varphi^{(GS)}$, $\epsilon_\varphi^{(SGS)}$ の PDF 分布が示されている. プロットは log-log スケールで描画されている. $\epsilon_k^{(SGS)}$ と $\epsilon_\varphi^{(SGS)}$ の PDF の大きさは DNS 法の ϵ_k と ϵ_φ に相当することがわかる. 高散逸率においては $\epsilon_k^{(SGS)}$ と $\epsilon_\varphi^{(SGS)}$ の PDF は $\epsilon_k^{(GS)}$ と $\epsilon_\varphi^{(GS)}$ よりはるかに高いことから, 高散逸率が主に陰的 SGS モデルから寄与されることがわかった. 乱流では一般的に高散逸領域はコルモゴロフスケールに相当するスケールでの変動構造に深く関わるので, このような構造は陰的 LES 法の粗い格子では再現できず, その代わりに陰的 SGS モデルによりその散逸効果がモデリングされる. しかしながら, 図(3.13)における $10^{-4} \sim 10^{-2}$ の散逸率と図(3.14)における $10^{-5} \sim 10^{-3}$ の散逸率の PDF 分布では GS 成分の方がより DNS 法の計算結果と一致していることから, 中間程度の散逸率が大スケールの勾配特性に関係することを意味している.

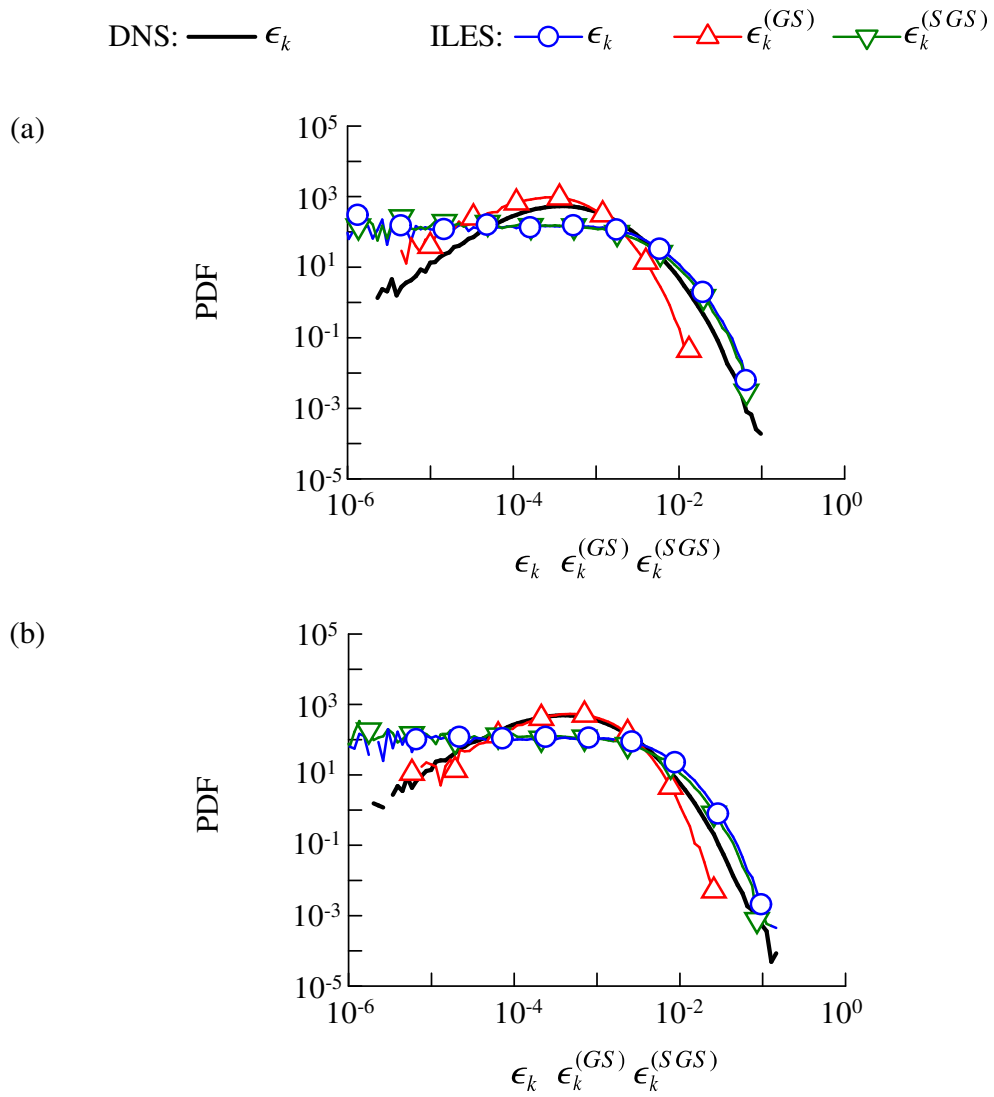


図 3.13 (a) 噴流マッハ数 0.6 と (b) 噴流マッハ数 2.6 における ϵ_k , ϵ_k^{GS} と ϵ_k^{SGS} の確率密度関数 (PDF).

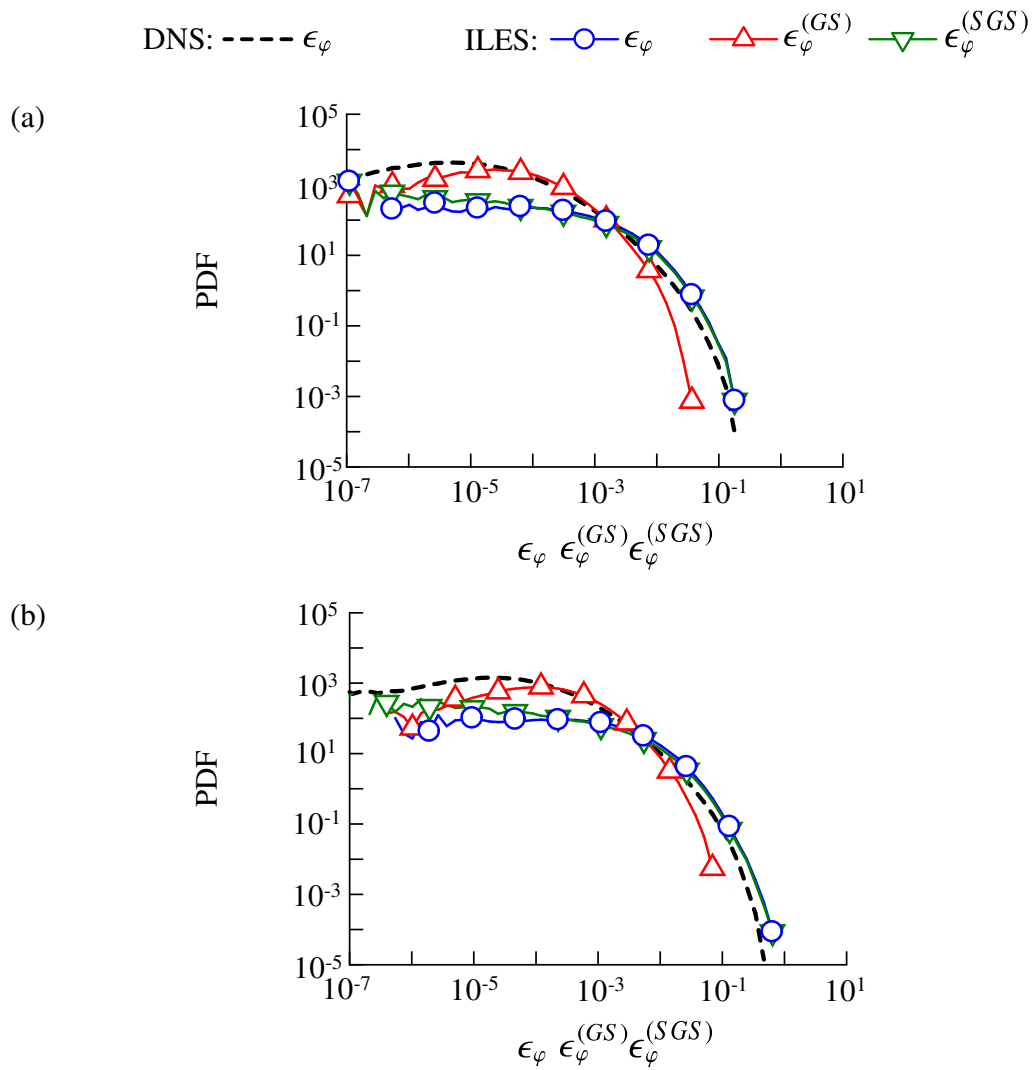


図3.14 (a) 噴流マッハ数0.6 と (b) 噴流マッハ数2.6 における ϵ_φ , ϵ_φ^{GS} と ϵ_φ^{SGS} の確率密度関数 (PDF).

全スケールの散逸率に対する陰的 SGS モデルの寄与は次式で評価される^[69].

$$s_{\epsilon k} = \frac{\epsilon_k^{(SGS)}}{\epsilon_k^{(GS)} + \epsilon_k^{(SGS)}}, \quad (3.17)$$

$$s_{\epsilon\varphi} = \frac{\epsilon_\varphi^{(SGS)}}{\epsilon_\varphi^{(GS)} + \epsilon_\varphi^{(SGS)}}. \quad (3.18)$$

図 (3.15) と (3.16) に計算時間 18, 22, 26 における $s_{\epsilon k}$ と $s_{\epsilon\varphi}$ の y 方向分布を示す. また coarse grid ケースの計算時間 18 での結果も載せてある. 噴流領域では, fine grid ケースの $s_{\epsilon k}$ と $s_{\epsilon\varphi}$ は 0.4~0.6 の範囲内にあるため, 陰的 SGS モデルの寄与が全体の半分を占めている. また coarse grid ケースでは $s_{\epsilon k}$ と $s_{\epsilon\varphi}$ がより大きいことから, 陰的 LES 法では空間解像度が低下すると陰的 SGS モデルの全スケールの散逸率に占める割合が増加することが明らかになった. 噴流の外には物理的な変動構造がないので, 図 (3.15)(a) と図 (3.16) の $y \geq 3$ では $s_{\epsilon k}$ と $s_{\epsilon\varphi}$ が既に 1 になっている. それに対して, マッハ数 2.6 の速度場では圧力波の伝播のため GS 成分の変動構造が噴流の外でも存在するため, 図 (3.15)(b) の $y \geq 3$ では $s_{\epsilon k}$ がまだ緩やかに増加していく傾向がみられた.

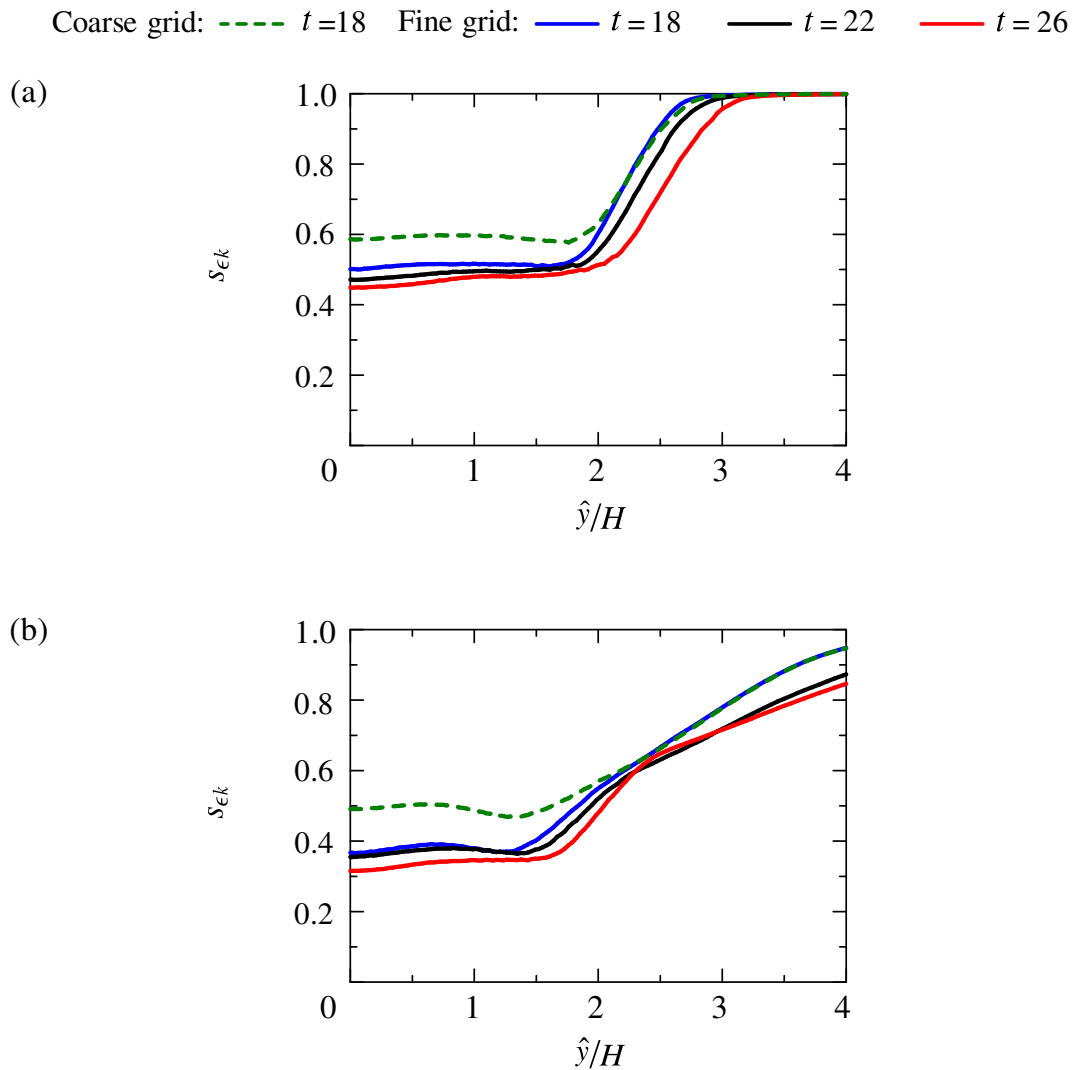


図 3.15 (a) 噴流マッハ数 0.6 と (b) 噴流マッハ数 2.6 における平均乱流エネルギー散逸率 $\langle \epsilon_k \rangle$ に対する $\langle \epsilon_k^{SGS} \rangle$ の割合の y 方向分布.

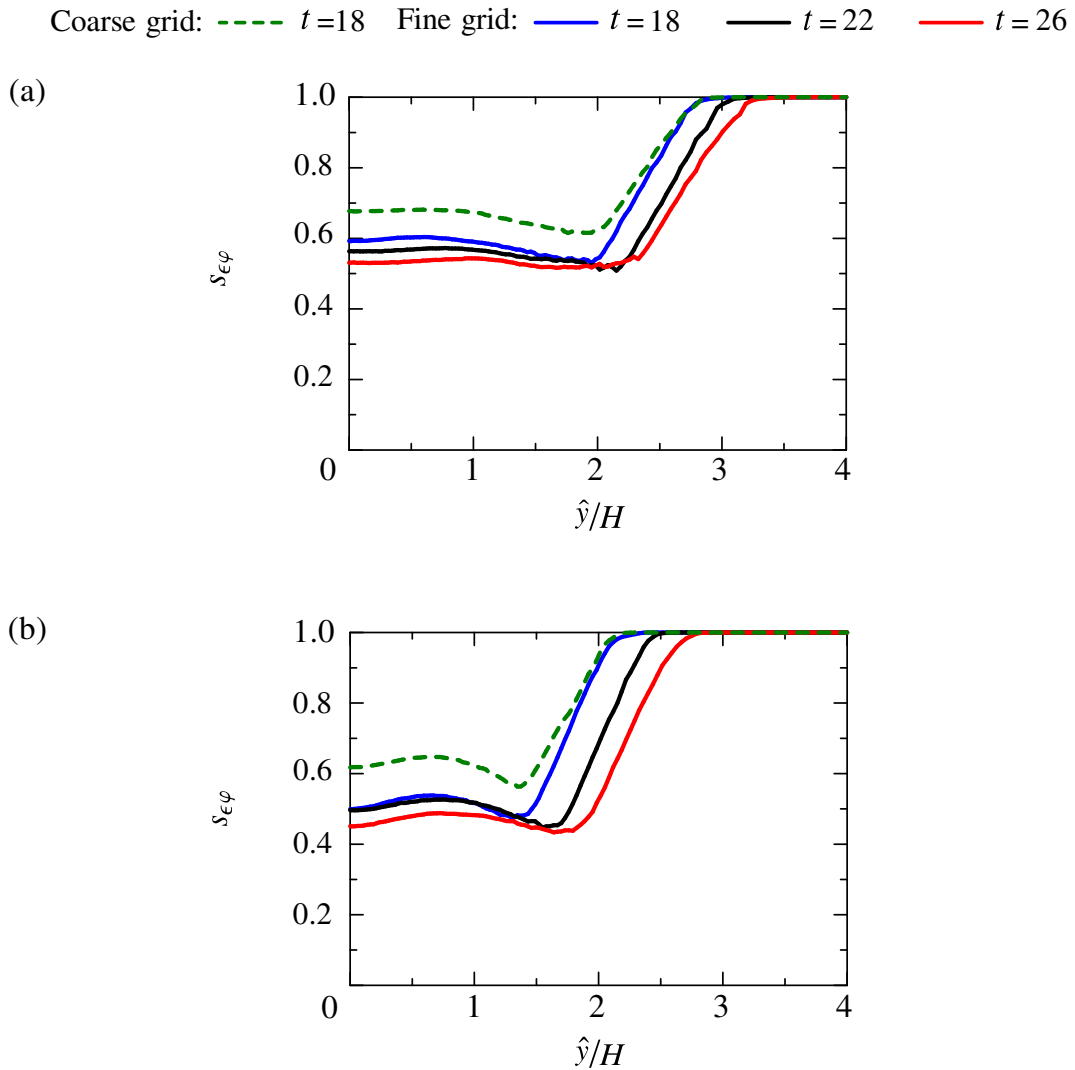


図 3.16 (a) 噴流マッハ数 0.6 と (b) 噴流マッハ数 2.6 における平均パッシブスカラーバリアンス散逸率 $\langle \epsilon_\varphi \rangle$ に対する $\langle \epsilon_\varphi^{SGS} \rangle$ の割合の y 方向分布.

図 (3.17) に計算時間 18 における ϵ_k^{SGS} , ϵ_k^{GS} と $\Theta = \partial u_j / \partial x_j$ の二次元可視化図を示す。図 (3.17)(c) では y 方向境界に向けて伝播していく圧力波が見られる。この 3 つの可視化図における圧力波の構造からみると、噴流の外では ϵ_k^{SGS} , ϵ_k^{GS} と $\Theta = \partial u_j / \partial x_j$ の間にお互いに高い関連性がある。このような波は急峻な速度勾配を形成させ、乱流エネルギーの生成に寄与する。図 (3.17)(a) では陰的 SGS モデルによる縞状の数値粘性構造はこの急な速度勾配を含む領域に現れるので、強い圧力波による非物理的な変動に対して陰的 SGS モデルが散逸機能を果たしていることがわかる。また、図 (3.17)(b) よりこのような強い圧力波構造は ϵ_k^{GS} によっても散逸されることがわかる。このことは図 (3.15)(b) の $y \geq 3$ において $s_{\epsilon k}$ が 1 に到達しないことに対応する。なお、パッシブスカラー場にはこのような圧力波が存在しないため、高マッハ数による噴流発展過程の抑制効果だけを受けることにより、図 (3.16)(b) に示すようにマッハ数 2.6 の方ではより噴流中心に近い y 方向位置で $s_{\epsilon\varphi} = 1$ が示された。

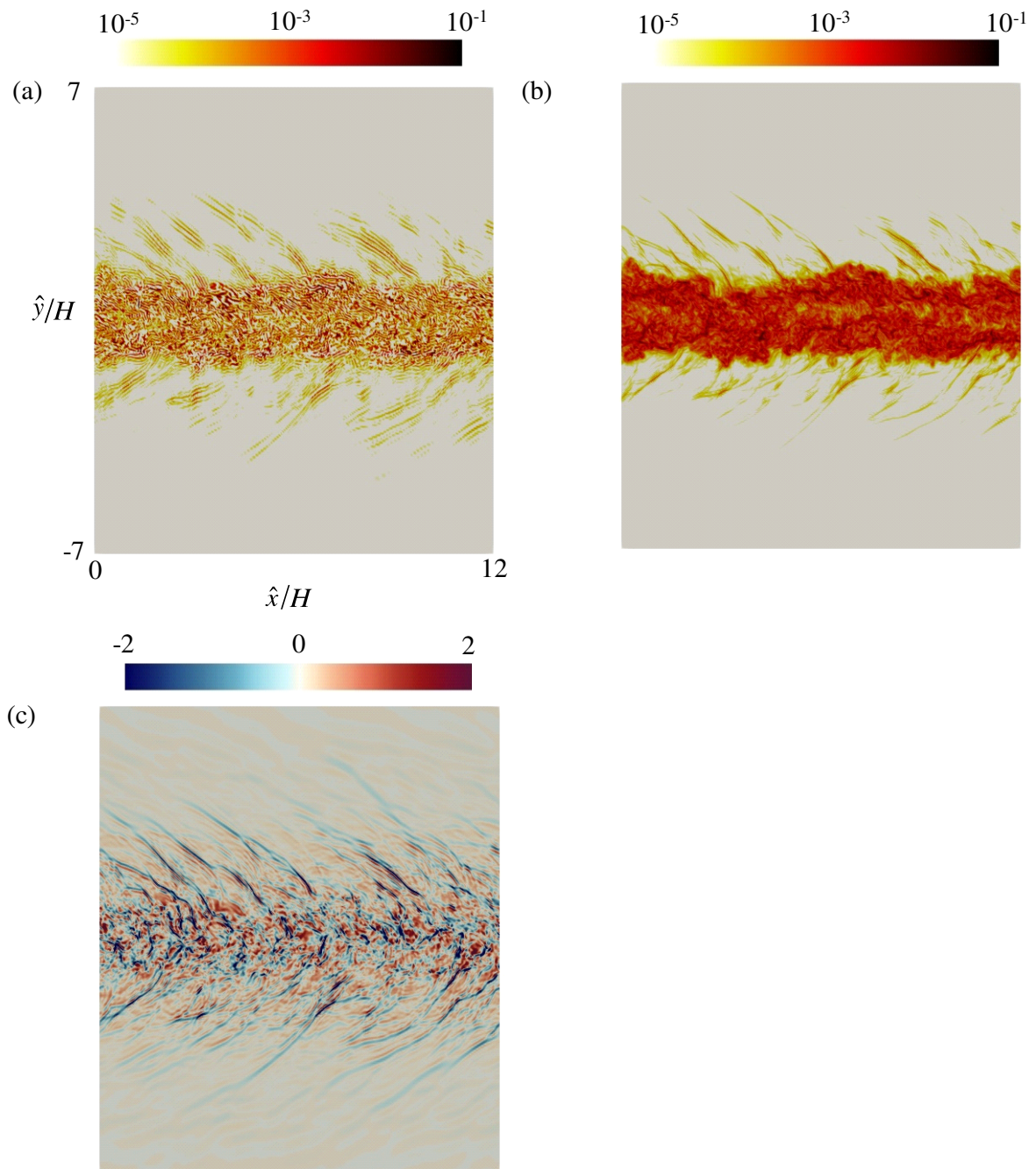


図 3.17 噴流マッハ数 2.6 における (a) ϵ_k^{sGS} , (b) ϵ_k^{GS} と (c) $\Theta = \partial u_j / \partial x_j$ の二次元可視化図.

3.5 結言

本章では、マッハ数 0.6 の亜音速噴流とマッハ数 2.6 の超音速噴流に対する数値計算を陰的 LES 法で行った。そのデータによる統計的な解析結果と前章の DNS 結果と比較することで、以下の項目に対する陰的 LES 法の有効性を確認した。また、陰的 LES 法は流体圧縮性によるパッシブスカラー場を正確に再現できた。

- 噴流ポテンシャルコア領域から自己相似領域までの速度場パッシブスカラー場の時間発展過程
- 自己相似領域における平均パッシブスカラーとその時間変化を支配するパッシブスカラーフラックス
- 自己相似領域における速度変動とパッシブスカラー変動の r.m.s. 値
- 自己相似領域の噴流中心とせん断層付近における瞬間パッシブスカラーの確率密度関数
- 自己相似領域における乱流エネルギーとパッシブスカラーバリエーションの平均散逸率

さらに、全スケールのパッシブスカラーバリエーションと乱流エネルギーの散逸率を格子成分とサブ格子成分に分解してそれぞれ解析した。格子成分の散逸率は DNS 法と同じ散逸項を差分スキームで計算され、サブ格子成分の散逸率は Selective フィルターと Shock capturing フィルターを組み合わせた陰的 SGS モデルの減衰関数で計算された。陰的 LES 法による瞬間散逸率の PDF を DNS 法の結果と比較し、小さい変動スケールに対する高散逸率は主に陰的 SGS モデルで支配され、大きい変動スケールに対する中間程度の散逸率は主に差分スキームで支配されることがわかった。また、本計算の陰的 SGS モデルはサブ格子スケールの乱流の高散逸効果を提供するだけでなく、擬似衝撃波のような圧力波による非物理的な振動の除去にも機能できる。本章で確認された陰的 LES 法は反応性の圧縮性流体用の連成計算法における分子混合モデルに適切なパッシブスカラー散逸情報をインプットできることが期待される。

第4章

分子拡散に対する混合体積モデル(MVVM)のアプリオリテスト

4.1 緒言

本章では、アプリオリテストによるパッシブスカラーの移流拡散方程式における分子拡散項に対する混合体積モデル^[10]の有効性を検証した結果について述べる。アプリオリテストとは検証対象の計算モデルを実装する前に基準な計算方法と検証対象の計算モデルをそれぞれ通して、同じ入力データから出力された結果を比較することで計算モデルのアルゴリズム自体の計算妥当性を検証する先験的なテストである。反応性流体の数値予測に対する格子とラグランジュ粒子の計算手法を組み合わせた連成計算法では、反応性物質濃度の時間変化に寄与する微視的な分子混合効果は分子混合モデルにより計算される。既存の研究では混合体積モデルと呼ばれる、混合体積という新しいコンセプトの混合空間を利用した分子混合モデルが圧縮性を考慮しない反応性流体における分子混合のモデリングとして提案されている。混合体積モデルを実装したLES-粒子法の実用化を目指すために、圧縮性を伴う混合場への混合体積モデルの適用性の検討が重要な課題になる。その第一歩として、本研究では第二章のDNS法で計算された瞬間パッシブスカラーのデータから式(2.4)における分子拡散項を混合体積モデルと中心差分スキームでそれぞれ計算した結果を比較するアプリオリテスト結果により、混合体積モデルの数値スキームの圧縮性流体中の分子混合効果に対する予測可能性を検討した。

4.2 混合体積モデル (MVM)

乱流中の混合に対するラグランジュ的な数値計算ではパッシブスカラーや粒子位置などの情報を持った仮想粒子群が用いられる。 n 番目の粒子位置を $\mathbf{x}^{(n)}$ とし、その位置におけるパッシブスカラーをそれぞれ $\varphi^{(n)} = \varphi(\mathbf{x}^{(n)}(t); t)$ とする。粒子における $\mathbf{x}^{(n)}$ と $\varphi^{(n)}$ の時間発展は次式のように記述されている。

$$\frac{d\mathbf{x}^{(n)}}{dt} = \mathbf{u}^{(n)} = \mathbf{u}(\mathbf{x}^{(n)}(t); t), \quad (4.1)$$

$$\frac{d\varphi^{(n)}}{dt} = \left[\frac{1}{ReSc\rho} \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho D \nabla \varphi) \right]^{(n)} = [D_\varphi]^{(n)}. \quad (4.2)$$

上式はパッシブスカラーの移流拡散方程式 (式 (2.4)) をラグランジュ的に記述して得られた式であり、式 (4.2) の右辺はそのまま式 (2.4) の右辺であり、ラグランジュ粒子法では計算要素の粒子が式 (4.1) のように局所流速に移動されるため、式 (4.1) は式 (2.4) の左辺の移流項に示された乱流混合効果を表す。ここで、分子拡散項が D_φ と略記されている。式 (4.1) の両辺を積分することで、粒子位置 $\mathbf{x}^{(n)}$ を求める。式 (4.1) 右辺の速度 $\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(n)}(t); t)$ は他のモデルや LES により得られる。しかし、仮想粒子が三次元的に移動するので、粒子間隔が不規則に変化する。そのため、 $[D_\varphi]^{(n)}$ の空間微分項は簡単な差分法の離散化手法で対応できなくなる。ここで混合体積モデルを圧縮性乱流中の $[D_\varphi]^{(n)}$ のモデリングに利用することを考える。また、本研究では無反応圧縮性乱流を扱うため、反応速度によるパッシブスカラーの影響を考慮されていないが、LES-粒子法による反応流の数値計算の場合、式 (4.2) の右辺に反応速度項を付け加えることを注意されたい。

図 (4.1) のように計算領域内の粒子 m の中から 1 つの粒子の番号を n と設定し、粒子 n に対する分子拡散を局所混合体積 V_m^n 内の粒子間相互作用でモデリングするのが混合体積モデルのコンセプトになる。混合体積における変数 A の平均値 $\langle A | V_m^n \rangle$ は次のようなカーネル関数を用いて表される。

$$\langle f | V_m^n \rangle = \frac{\sum_{m=1}^{N_p} G_n(\mathbf{x}^{(m)}) f^{(m)}}{\sum_{m=1}^{N_p} G_n(\mathbf{x}^{(m)})}, \quad (4.3)$$

$$G_n(\mathbf{x}^{(m)}) = \begin{cases} 1 & \text{混合体積内 } V_m^n \text{ の粒子} \\ 0 & \text{それ以外の粒子} \end{cases}. \quad (4.4)$$

ここで、 N_p は計算領域内の粒子数である。混合体積モデルでは従来の IEM モデル^[70] と

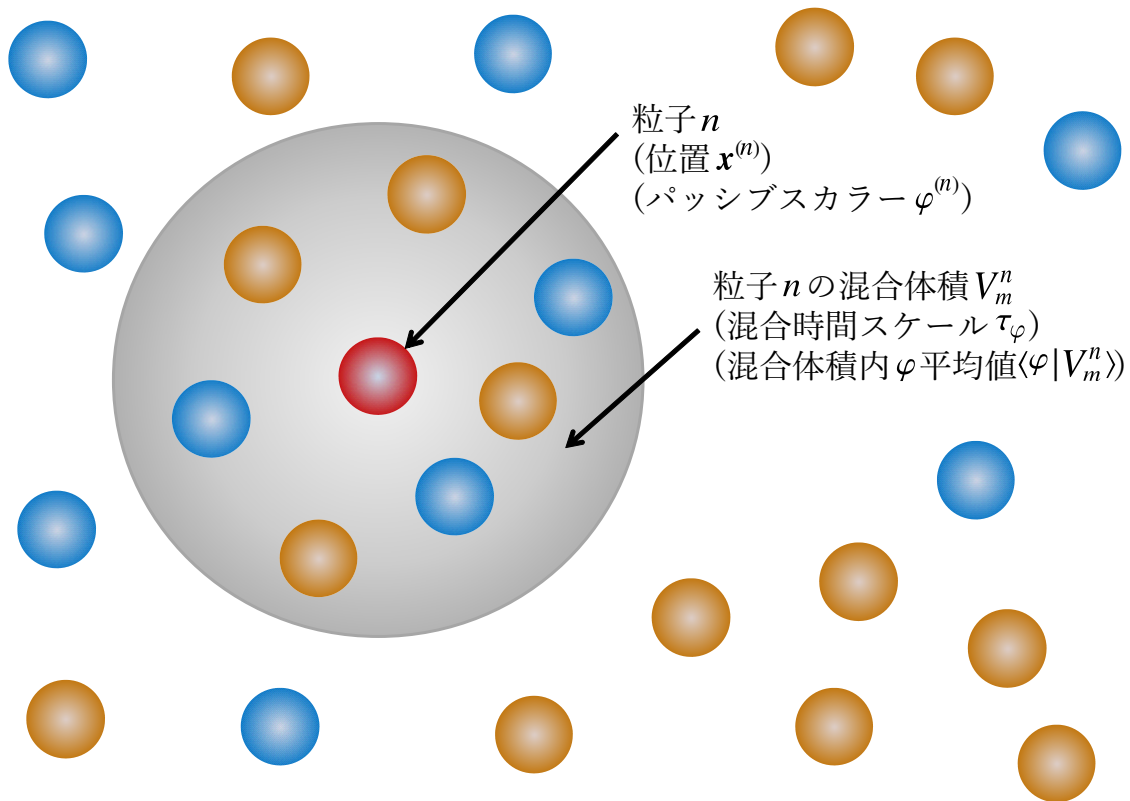


図 4.1 ラグランジュ粒子群 (小さい球体) と混合体積 (大きい球体) の概念図.

同じように各粒子におけるパッシブスカラーが体積内の平均値に緩和する. n 番目の粒子における分子拡散項に対する混合体積モデルは以下のように表される.

$$[D_\varphi]_{\text{mix}}^{(n)} = \frac{1}{\tau_\varphi} (\langle \varphi | V_m^n \rangle - \varphi^{(n)}). \quad (4.5)$$

ここで, V_m^n は粒子 n に対して設定された混合体積を表す. 下付きの mix は混合体積モデルを表す. τ_φ はパッシブスカラーに対する混合時間スケールである. それぞれ分子拡散率を支配するので, 混合時間スケールの予測は分子混合モデルにとって重要であり, 分子混合モデルの精度に影響する. 過去の非圧縮性噴流に対する混合体積モデルに関する研究^[12]では, 混合時間スケールを求める式は SGS スカラーバリエーションの輸送方程式から導かれ, τ_φ は次式のように表される.

$$\tau_\varphi = \frac{\langle \varphi'^2 | V_m^n \rangle}{\langle \varepsilon_\varphi | V_m^n \rangle}. \quad (4.6)$$

ここで, $\langle A | V_m^n \rangle$ は混合体積 V_m^n 内の粒子データ群を平均化する値になる. $\langle A'^2 | V \rangle = \langle A^2 | V \rangle -$

$\langle A|V\rangle^2$ は分散値である。単位質量パッシブスカラー散逸率 $\hat{\varepsilon}_\phi = \hat{D}\nabla\hat{\phi}\cdot\nabla\hat{\phi}$ であり、上式は各粒子位置における物理量 (物質拡散係数 D と密度 ρ) により計算される。

4.3 検証方法

本節では混合体積モデルのアプリオリテスト手順を説明する．比較には主に DNS により得られた自己相似領域の噴流中心におけるパッシブスカラーを用いた．各 DNS 格子に対するアプリオリテストの手順を図 (4.3) に示す．

<手順1>

図 (4.2) のような半径 r_m の球状混合体積 V を考える．混合体積内の混合粒子数を N_m とする．球状体積中心に位置する粒子 1 の位置 $\mathbf{x}^{(1)}$ は DNS 格子位置と一致させる．

<手順2>

それ以外の $N_m - 1$ 個の粒子を混合体積内に入るようにランダム的に配置する．

<手順3>

各粒子上の物理量 (パッシブスカラー, パッシブスカラー勾配と物質拡散係数) を粒子位置周りの DNS 格子データから線形補間で求める．

<手順4>

式 (4.6) を用いることにより, 混合体積 V の混合時間スケールを計算する．さらに, 混合体積中心粒子の分子拡散項 ($[D_\phi]_{\text{mix}}$ と記す) を混合体積モデルにより計算し, DNS データから中心差分法で求められた粒子 1 の位置での分子拡散項 (D_ϕ と記す) と比較する．統計的な収束性を向上するために, 手順2における粒子の位置をランダムに変更し手順2-4を5回繰り返す．繰り返し回数を Num_iter とする．

<手順5>

上記の計算を噴流中心のすべての格子点で行い, 中心差分により計算された D_ϕ を混合体積モデルにより得られた $[D_\phi]_{\text{mix}}$ を比較するための統計量計算を行う．

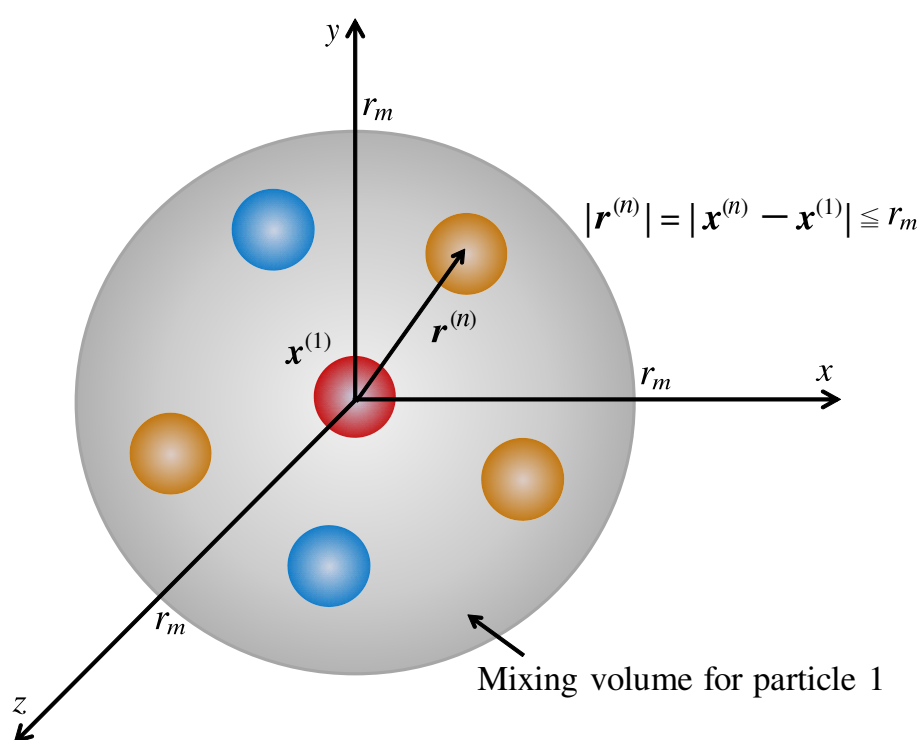


図4.2 アプリオリ検証用の混合体積.

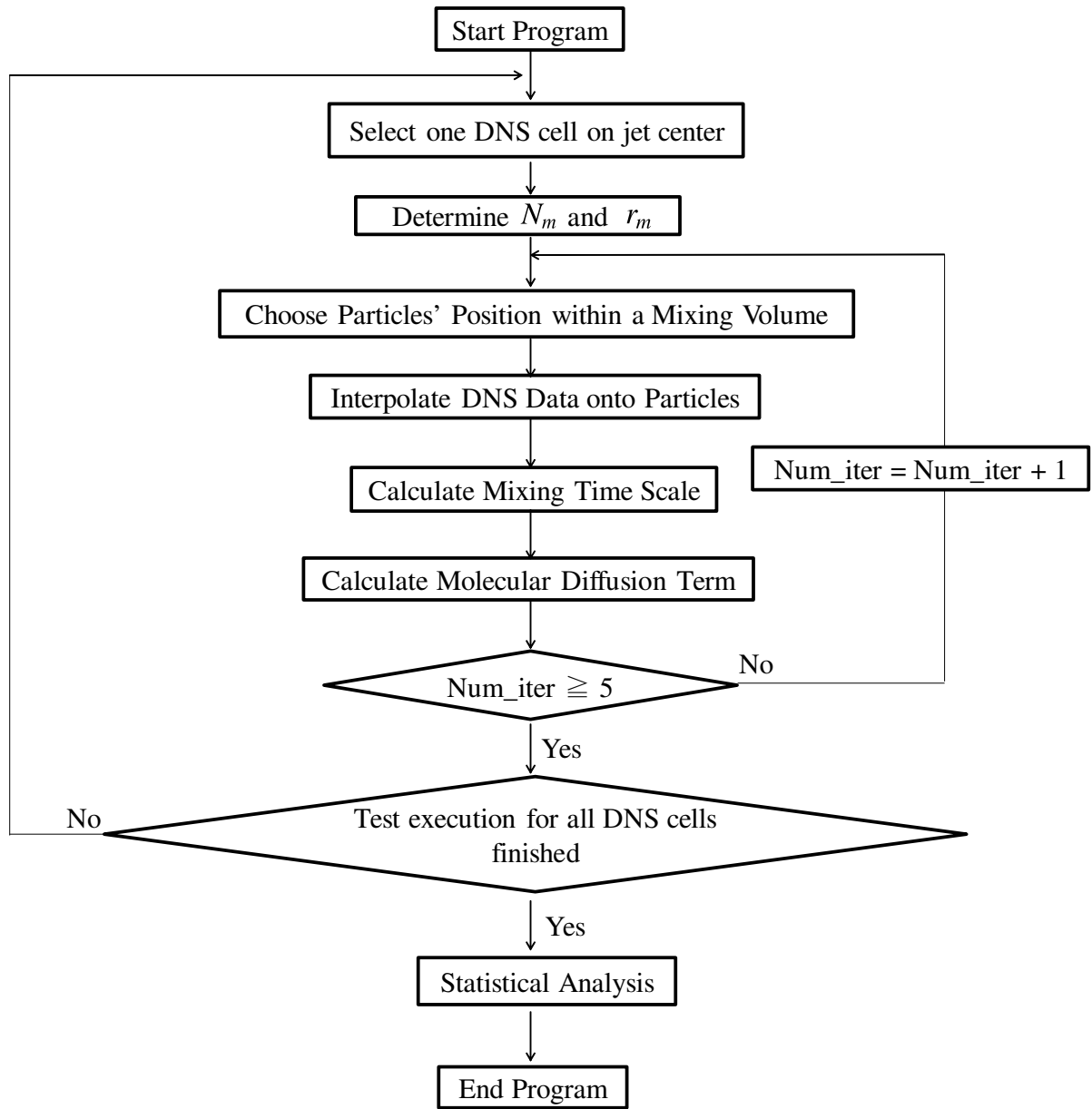


図4.3 アプリオリ検証手法フローチャート.

4.4 検証結果

前節に示した方法により，混合体積モデルの特性について解析する．

図(4.4)に様々な混合粒子数 N_m と混合体積半径 r_m に対して得られた分子拡散項 D_φ と $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ の相関係数を示す．ここでは，次式で相関係数 $Cor(D_\varphi, [D_\varphi]_{\text{mix}})$ を計算し，定量的に相関解析をする．

$$Cor(D_\varphi, [D_\varphi]_{\text{mix}}) = \frac{\langle (D_\varphi - \langle D_\varphi \rangle_c) ([D_\varphi]_{\text{mix}} - \langle [D_\varphi]_{\text{mix}} \rangle_c) \rangle_c}{\sqrt{\langle (D_\varphi - \langle D_\varphi \rangle_c)^2 \rangle_c \langle ([D_\varphi]_{\text{mix}} - \langle [D_\varphi]_{\text{mix}} \rangle_c)^2 \rangle_c}}. \quad (4.7)$$

本研究では，正の相関には4つの基準を設けた． $Cor = 0 \sim 0.2$ が「ほとんど相関なし」， $Cor = 0.2 \sim 0.4$ が「弱い相関あり」， $Cor = 0.4 \sim 0.7$ が「やや相関あり」， $Cor = 0.7 \sim 1.0$ が「かなり強い相関がある」になる．粒子数 N_m が2のとき，混合体積の大きさに関係なく相関係数がほぼ0になる． N_m の増加と r_m/η の減少に従い，相関係数が大きくなる傾向が観察された．このような傾向は過去の非圧縮性噴流におけるMVMの検証結果とよく一致する．すなわち，圧縮性流れでも混合体積内の粒子密度の増加とともに，MVMの精度がよくなる．また粒子数が15以上になるとき，MVMのマッハ数への依存性が顕著になり，相関係数の値がマッハ数の増加とともに減少することがわかる．

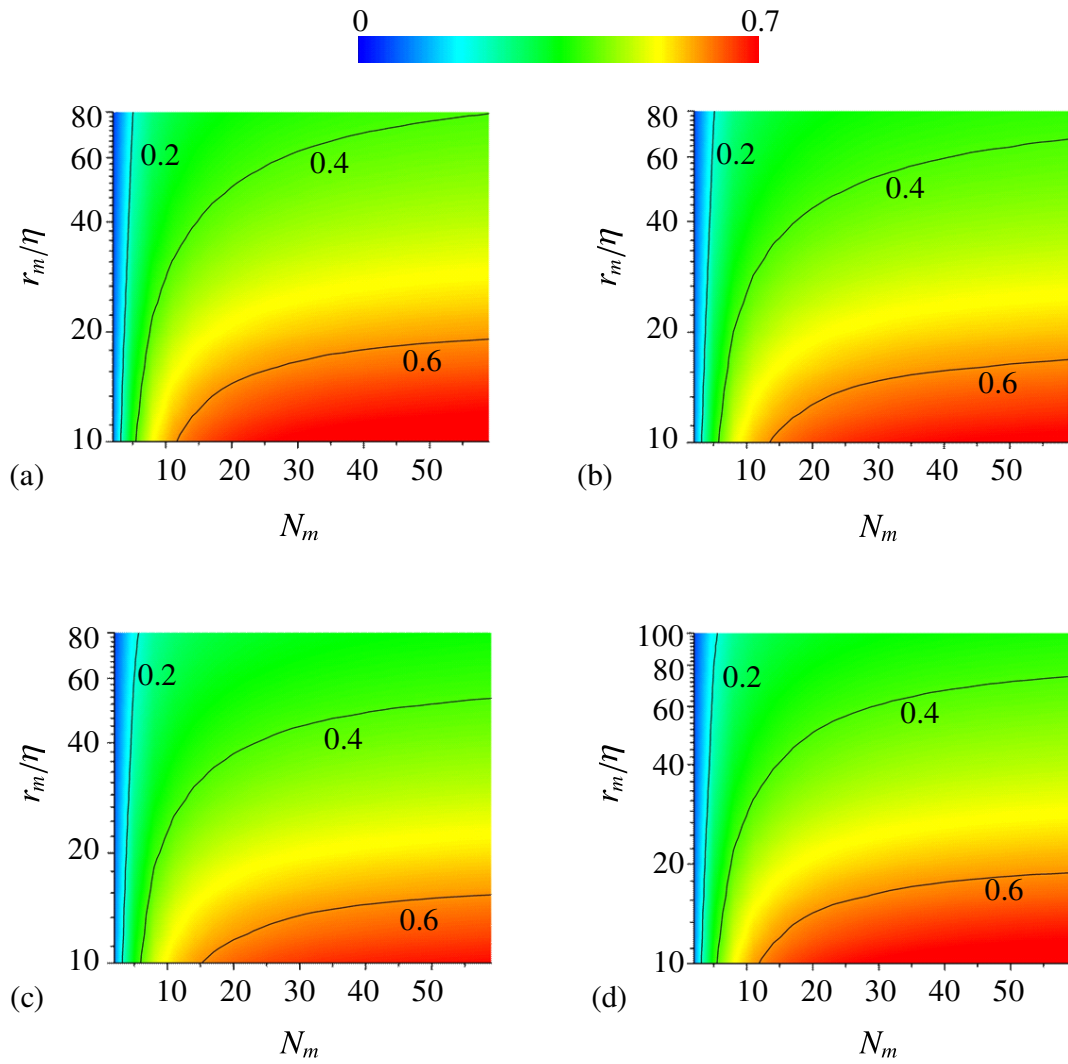


図 4.4 D_φ と $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ の相関係数分布 : (a) Run A, (b) Run B, (c) Run C, (d) Run D.

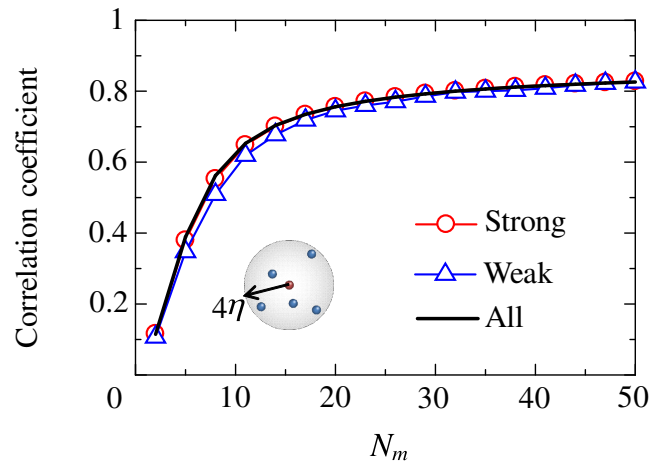


図 4.5 強い圧縮・膨張領域 (Strong) と弱い領域 (Weak) に対して計算された D_φ と $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ の相関係数 ($r_m = 4\eta$).

圧縮性の強さは流体膨張・圧縮による密度変化の大きさに深く関わっている。密度の時間変化率は一般的に dilatation $\nabla \cdot \mathbf{u}$ で表される。Run C の圧縮性噴流中心で半径 4η の混合体積に対して得られた相関係数の粒子数への依存性を図 (4.5) に示す。ここでは、 $\langle \Theta | V_m^n \rangle > 0.5$ と $\langle \Theta | V_m^n \rangle < 0.1$ を満たす混合体積それぞれに対して得られた結果も示されている。 $\langle \Theta | V_m^n \rangle = 0.5$ は噴流中心面における dilatation の絶対値の平均値 $\langle |\nabla \cdot \mathbf{u}| \rangle_c$ と等しく、また $\langle \Theta | V_m^n \rangle = 0.1$ はその平均値の 0.2 倍に対応する。これら強い膨張・圧縮領域と弱い領域に対する相関係数の大きさは全領域での相関係数の分布に近いことから、流体の膨張圧縮による MVM への影響は小さいことがわかった。

図 (4.6) と図 (4.7) に、半径 14η の混合体積内の粒子数 2 と 14 における $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ と D_φ の Joint PDF を示す。各軸は D_φ の変動 r.m.s. 値で正規化されている。図 (4.6) と (4.7) に示すように、粒子数 2 と 14 とで分布が大きく変化する。4 つの象限に高い確率がみられる図 (4.6) に対して、図 (4.7) では第一象限と第三象限に大きな確率が現れる、このように、粒子数が多くなると、正の相関が顕著になることが確認できた。

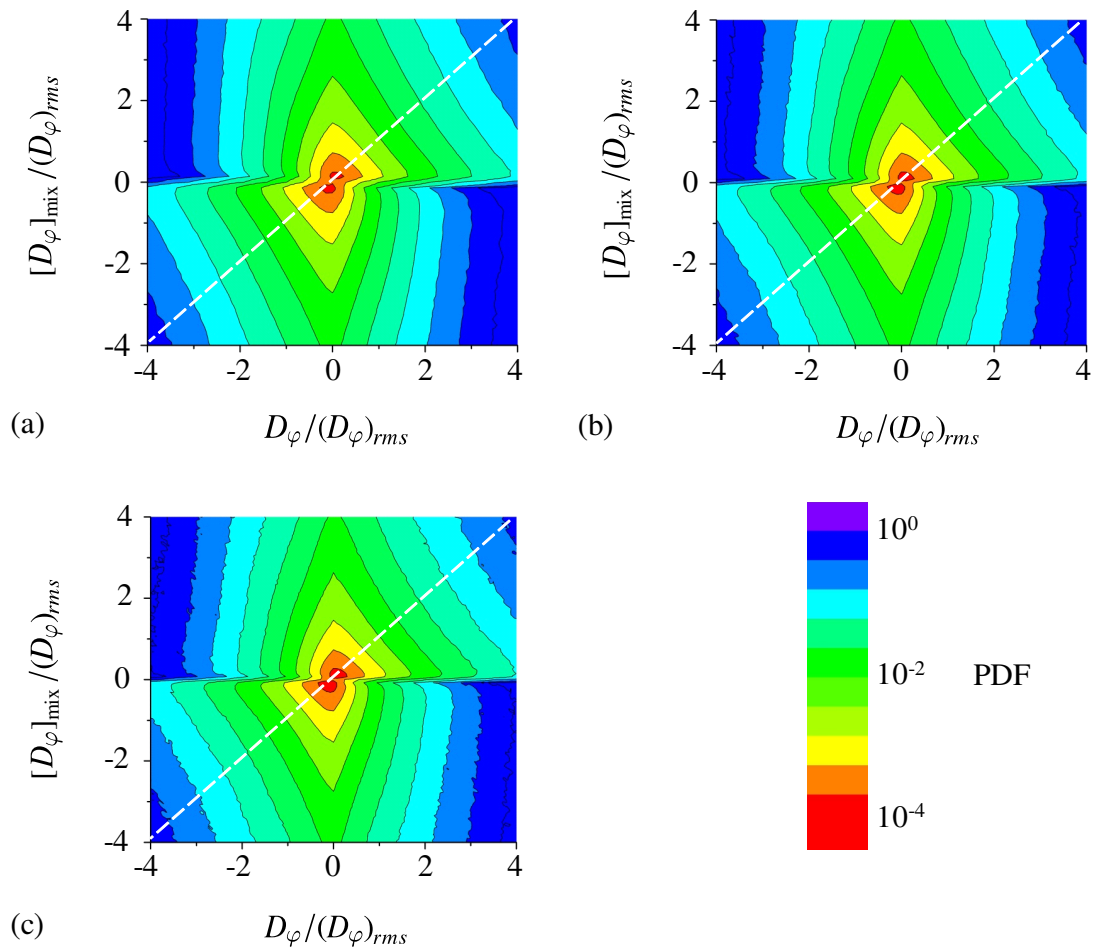


図 4.6 中心差分と MVM により得られた分子拡散項 (それぞれ D_φ , $[D_\varphi]_{\text{mix}}$) の Joint PDF ($N_m = 2$, $r_m = 14\eta$) : (a) Run A, (b) Run B, (c) Run C.

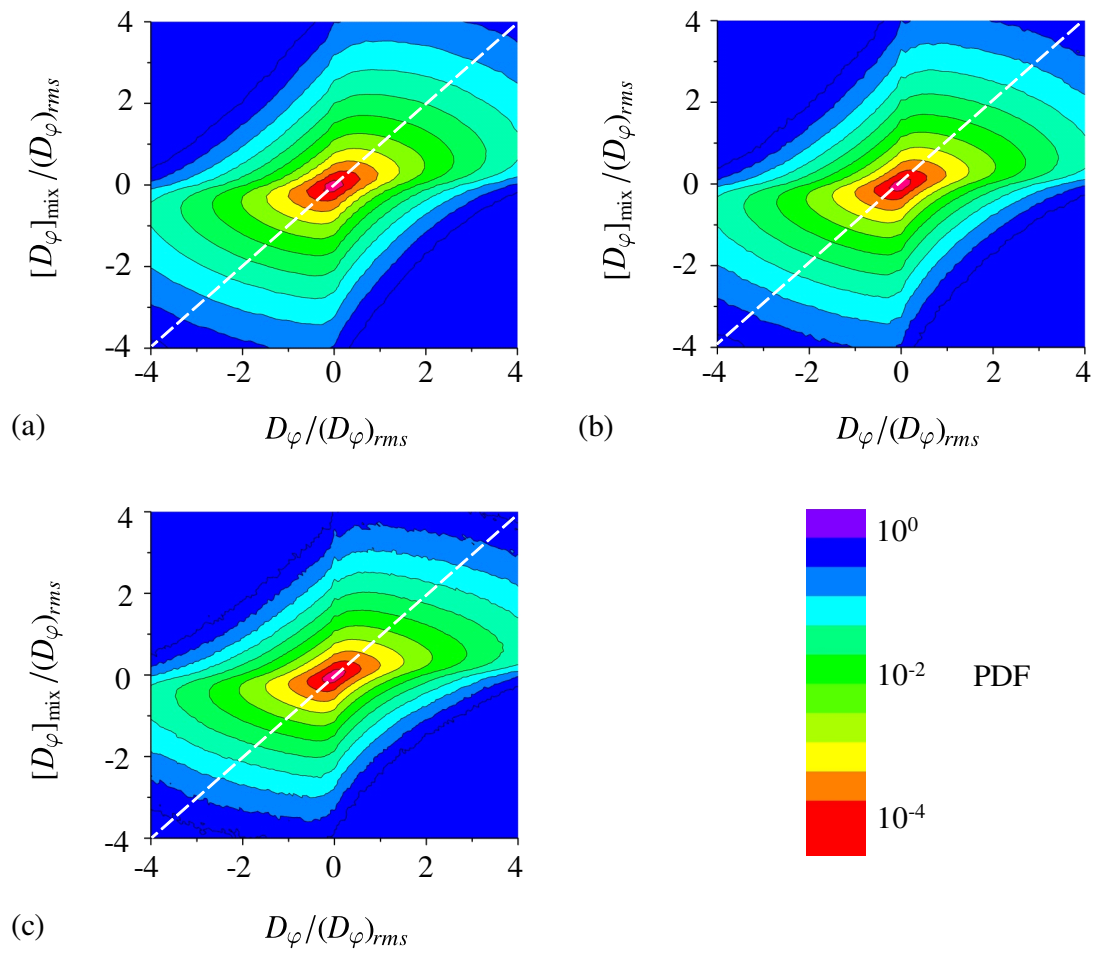


図 4.7 中心差分と MVM により得られた分子拡散項 (それぞれ D_φ , $[D_\varphi]_{\text{mix}}$) の Joint PDF ($N_m = 14$, $r_m = 14\eta$) : (a) Run A, (b) Run B, (c) Run C.

図(4.8)と(4.9)に半径 14η と 70η とする混合体積の粒子数 2, 8, 14 におけるパッシブスカラーの混合時間スケール τ_φ の PDF を示す. 混合体積の大きさに関わらず, 図(a), (b), (c)を比較することにより, マッハ数の影響がほとんど見られないことがわかった. 2粒子の場合では, 2粒子間のスカラー量の大きな違いのため, 分子拡散モデルによりスカラーの値が不連続にジャンプするような非物理的な混合が発生する, これにより, 2粒子の場合には $\tau_\varphi = 0$ 付近にピークが現れ, 図(4.4)に示した相関を低下させる. さらに, 粒子数を増やすと, τ_φ のピーク値が徐々に 0 から離れており, スカラー空間に対して混合がスムーズに進行するようになる. また, $\tau_\varphi \sim 1$ における PDF では図(4.8)に示す混合体積半径 14η の方が高いが, $\tau_\varphi \gg 1$ における PDF では図(4.9)に示す混合体積半径 70η の方が高いことから, 混合体積が小さくなると, 速い混合がより多く生じる傾向が観察された.

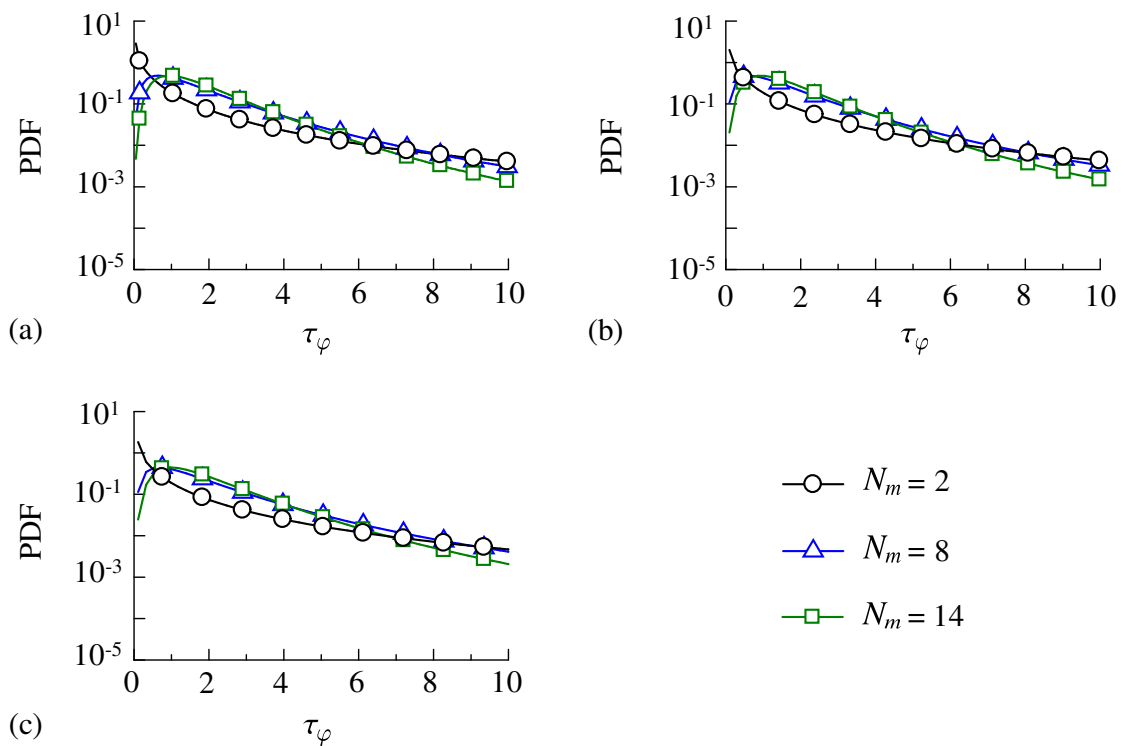


図 4.8 混合体積半径 14η における混合時間スケール τ_φ の PDF : (a) Run A, (b) Run B, (c) Run C.

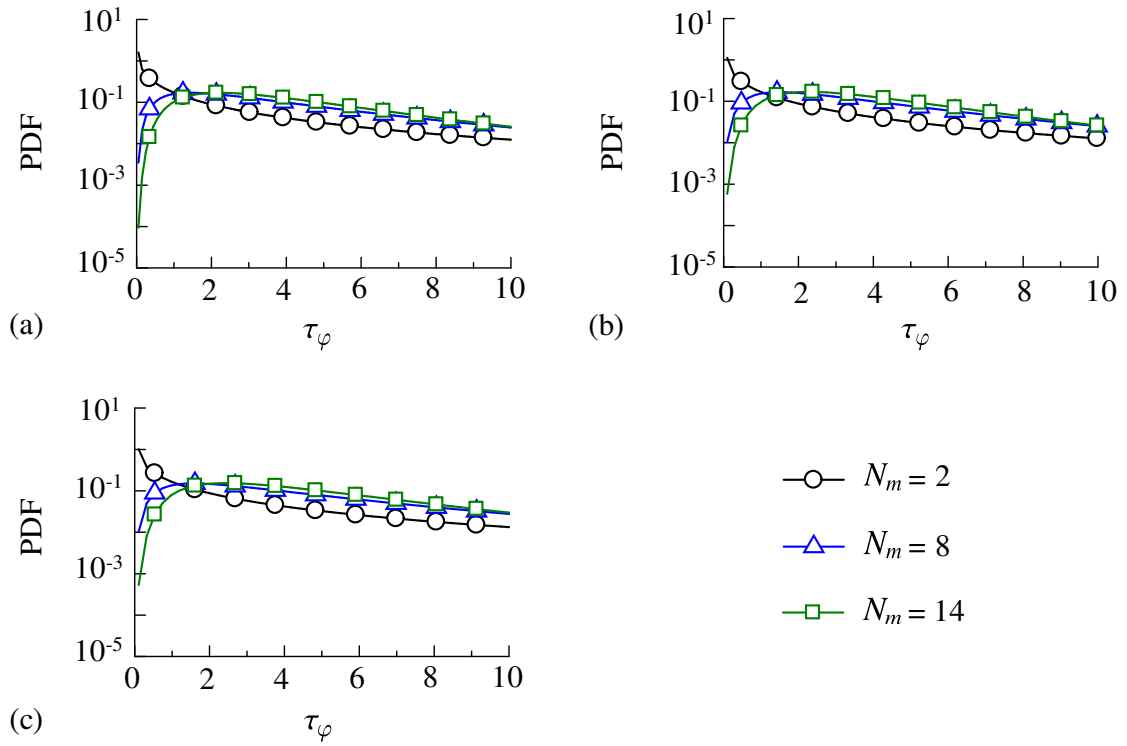


図 4.9 混合体積半径 70η における混合時間スケール τ_φ の PDF : (a) Run A, (b) Run B, (c) Run C.

分子拡散による平均的なスカラー量の変化を考えるため、 φ の値で条件付けした平均分子拡散項 $\langle D_\varphi | \varphi \rangle$ を評価する。通常のアプローチは、 $\langle D_\varphi \rangle$ 、パッシブスカラーの確率密度関数 $p(\varphi)$ と φ に対する条件付きの平均分子拡散項 $\langle D_\varphi | \varphi \rangle$ の関係は以下のようになる。

$$\langle D_\varphi \rangle = \int_0^1 p(\varphi) \langle D_\varphi | \varphi \rangle d\varphi. \quad (4.8)$$

図(4.10)にパッシブスカラー空間における $p(\varphi) \langle D_\varphi | \varphi \rangle$ 分布を分子混合モデル $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ と $[D_\varphi]$ に対して示す。ここで、 $\langle A|B \rangle$ は x - z 平面から B 条件を満足する格子データ群を用いた A の平均値であり、条件つき平均値とも呼ばれる。横軸はパッシブスカラーの変動 $\varphi' = \varphi - \langle \varphi \rangle$ を変動 r.m.s. 値 φ'_{rms} で正規化した値となる。ここでは、粒子数 14 に対して混合体積半径 $14\eta, 42\eta, 70\eta$ とした場合の結果を示す。 $\varphi' > 0$ では分子拡散項の平均値が負になり、 $\varphi' < 0$ では分子拡散項の平均値が正になる。このことから、パッシブスカラーが値の大きいところから小さいところへ輸送されていることが確認できる。分子混合モデルでは混合体積半径に関わらず DNS と同様の $p(\varphi) \langle D_\varphi | \varphi \rangle$ が得られている、しかし、図(4.10)(c)の $\varphi' > 0$ において、半径が大きい場合に MVM と DNS の差が大きくなっている。これは混合体積が大きくなるにつれ、粒子のアンサンブル平均と実際の局所体積平均の差異が大きくなるからであると考えられ、マッハ数の増加による間欠性の変化によるものと予想される。

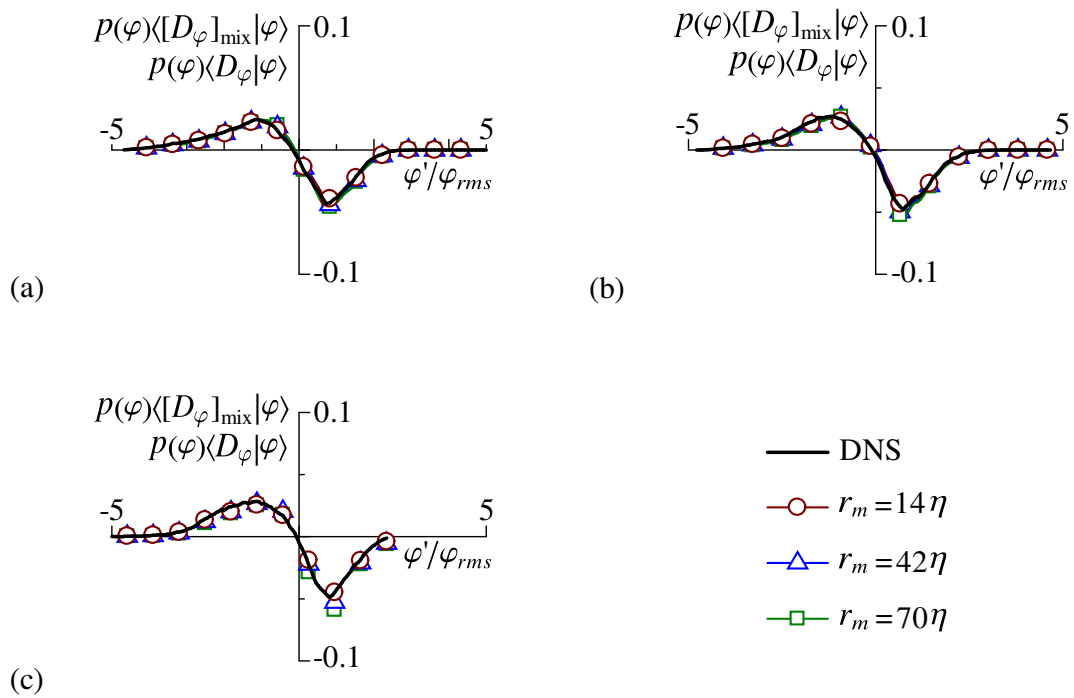


図4.10 14粒子における φ 空間の $p(\varphi)\langle D_\varphi|\varphi\rangle$ あるいは $p(\varphi)\langle[D_\varphi]_{\text{mix}}|\varphi\rangle$: (a) Run A, (b) Run B, (c) Run C.

本テストでは乱流と非乱流が共存するせん断層^[71,72] 付近の $y = b_\varphi$ における DNS データも利用して検証した。このような間欠性の強い領域は特に未予混合燃焼の進行促進において重要な役割を担っている^[73]。図(4.11)(a)に噴流マッハ数 1.6 の自己相似領域の $y = b_\varphi$ における D_φ と $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ の相関係数分布を示す。図(4.4)と似たような分布形状が得られた。図(4.11)(b)では噴流マッハ数 1.6 の自己相似領域の $y = b_\varphi$ における 14 粒子における φ 空間の $p(\varphi)\langle D_\varphi|\varphi \rangle$ あるいは $p(\varphi)\langle [D_\varphi]_{\text{mix}}|\varphi \rangle$ が示された。噴流中心の検証結果と同じように、せん断層付近においても $p(\varphi)\langle [D_\varphi]_{\text{mix}}|\varphi \rangle$ のプロットは $p(\varphi)\langle D_\varphi|\varphi \rangle$ とよく一致することが確認され、MVMにより自己相似領域のせん断層付近における分子拡散項も正確に評価可能であることがわかる。

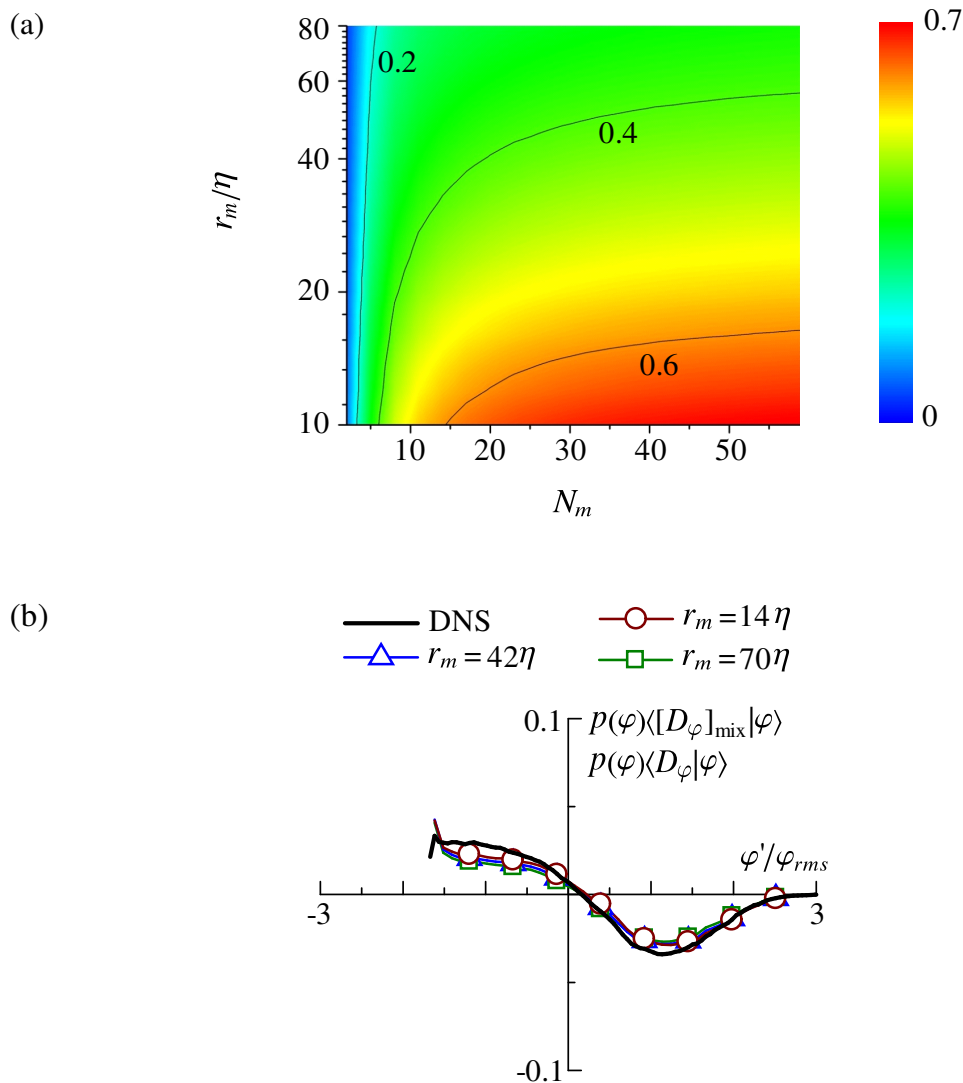


図 4.11 $t = 22$ の $y = b_\varphi$ における検証 : (a) D_φ と $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ の相関係数分布, (b) 14 粒子における φ 空間の $p(\varphi)\langle D_\varphi|\varphi \rangle$ あるいは $p(\varphi)\langle [D_\varphi]_{\text{mix}}|\varphi \rangle$. Run B 条件の DNS データを使用する。

Run B 条件の DNS データを用いて $t = 6$ のパッシブスカラー場を図 (4.12) のように可視化した。この時間のパッシブスカラー場では自己相似領域と流れ構造が大きく異なることがわかる。噴流中心にパッシブスカラーの変動構造が形成していないことに対して、せん断層内における y 方向の急なパッシブスカラー φ の変化が見られた。図 (4.11) と同様に、図 (4.13) に $t = 6$ のテスト結果を示す。 D_φ と $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ の相関関係や $p(\varphi)\langle[D_\varphi]_{\text{mix}}|\varphi\rangle$ の φ' に対する分布形状が適切に再現されたが、定量的には $p(\varphi)\langle[D_\varphi]_{\text{mix}}|\varphi\rangle$ と $p(\varphi)\langle D_\varphi|\varphi\rangle$ の間に明らかな差が生じた。また、3つの MVM 結果の中で混合半径の小さいほうが明らかに DNS 結果に近い。したがって、混合体積モデルを圧縮性噴流用の LES-粒子法に実装する場合、乱流遷移領域のせん断層付近における分子拡散のモデリングに使う混合体積を自己相似領域に使う混合体積より小さめに設定することが示唆される。

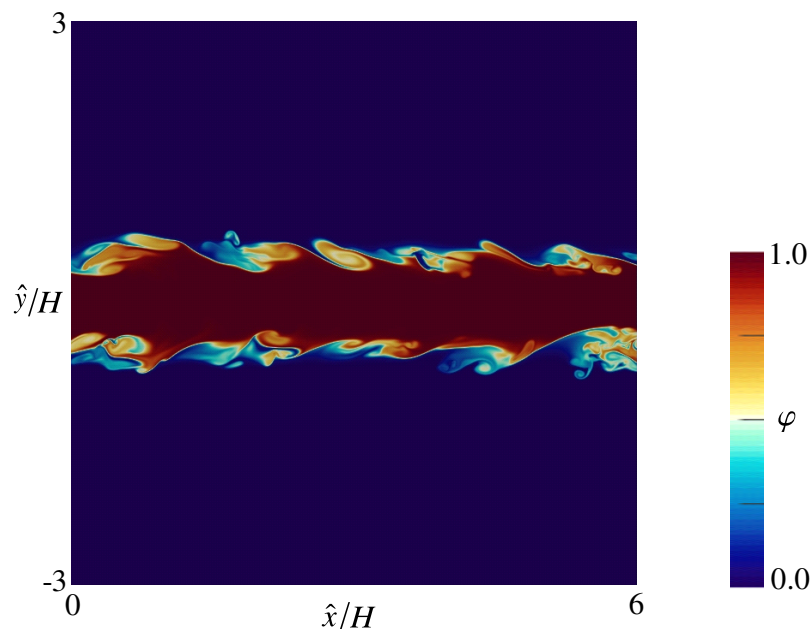


図 4.12 Run B 条件の DNS 法による $t = 6$ のパッシブスカラー場の可視化。

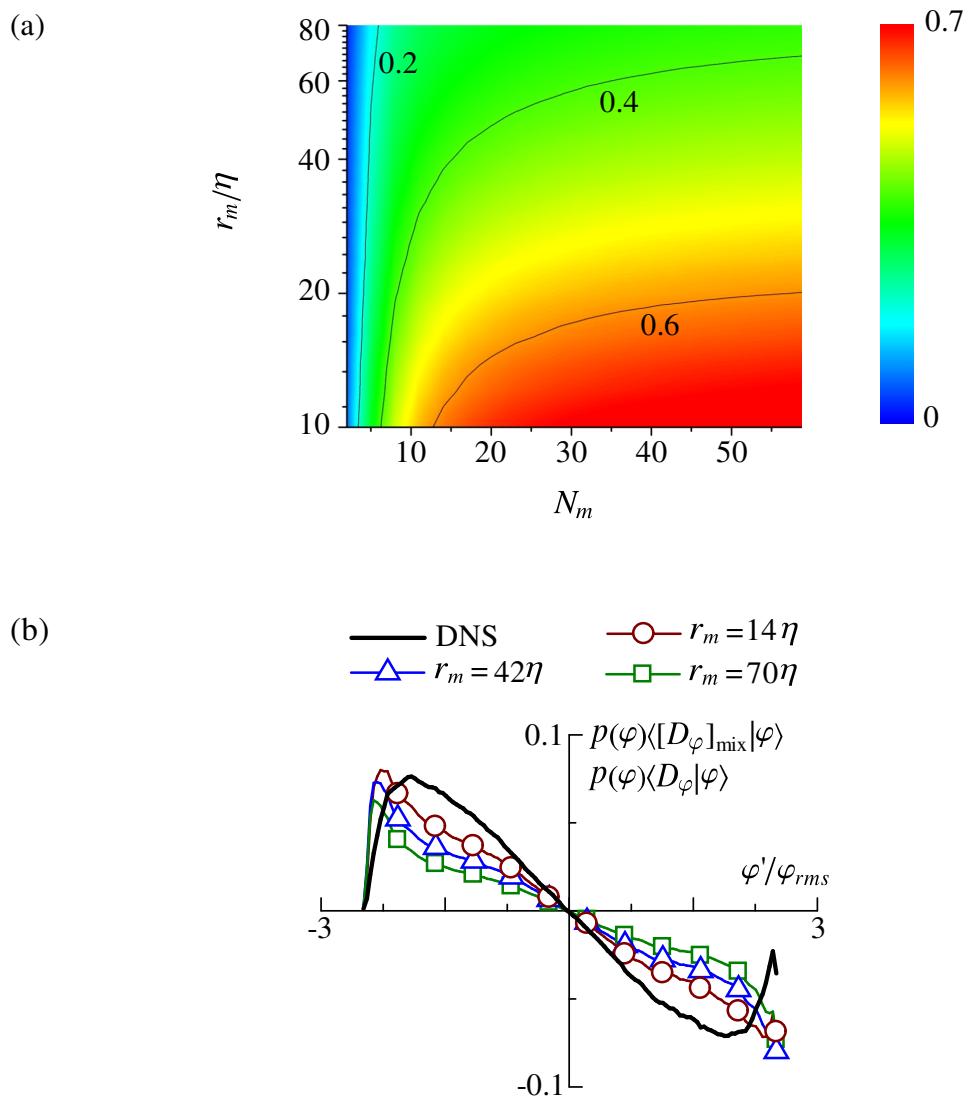


図4.13 $t = 6$ の $y = b_\varphi$ における検証 : (a) D_φ と $[D_\varphi]_{\text{mix}}$ の相関係数分布, (b) 14 粒子における φ 空間の $p(\varphi)\langle D_\varphi|\varphi \rangle$ あるいは $p(\varphi)\langle [D_\varphi]_{\text{mix}}|\varphi \rangle$. Run B 条件の DNS データを使用する.

4.5 結言

本章では、非圧縮性流れの分子拡散項に対して考案された混合体積モデル (MVM) を圧縮性乱流中の分子拡散項へと拡張し、噴流マッハ数 0.6, 1.6, 2.6 の時間発展型二次元噴流の DNS データベースを用いたアプリオリ検証を行った。混合体積モデルを用いることで移流拡散方程式に支配されたパッシブスカラーの分子拡散項を精度よく予測できることがわかった。過去の非圧縮性流れ用の混合体積モデルの検証結果^[12]と同様に、分子拡散項において混合体積内の粒子密度の増加とともに混合体積モデルの予測精度が改善されることがわかった。また、乱流遷移領域における高精度な分子拡散の平均解析に必要な粒子密度の設定許容範囲が自己相似領域よりも厳しいことがわかった。

第5章

結論

本論文では圧縮性乱流における物質混合過程を直接数値計算法 (DNS 法) で解明し、格子と粒子の二つの計算要素を組み合わせた LES-粒子法を圧縮性反応流の予測へ拡張することを目指し、DNS データベースに基づき、格子扱いの陰的 LES 法と粒子扱いの混合体積モデルが圧縮性乱流場・物質混合場の数値予測に対する有効性の検証を行った。ここでは、各章で得られた主な結論についてまとめて示す。

第二章ではパッシブスカラー混合を伴う圧縮性二次元噴流の直接数値計算法 (DNS 法) を行った。噴流レイノルズ数 (14000, 32000) と噴流マッハ数 (0.6, 1.6, 2.6) と組み合わせた4つの計算条件ケースに対して計算が行われた。DNS データによる主な考察について、乱流が発達した領域における瞬時の温度場とパッシブスカラー場を可視化することで噴流マッハ数の増加に伴い、噴流広がり方向におけるパッシブスカラーの乱流拡散の抑制が強くなることがわかった。また、噴流レイノルズ数の増加に伴い、より小さいパッシブスカラー変動構造が現れることが確認された。噴流マッハ数の増加に伴い、噴流領域内部の温度増加および噴流領域周辺の Jet crackle 構造が顕著になる。また、温度場に対する噴流レイノルズ数の効果はパッシブスカラーと同じになることがわかった。また、流れ方向速度場とパッシブスカラー場における半値幅の時間変化分布から、乱流が発達している時間帯で半値幅の二乗が線形的に増加することが確認できた。また、噴流マッハ数の増加による半値幅の増加もパッシブスカラーの乱流拡散の抑制の裏付けである。正規化された平均速度、平均パッシブスカラー、速度 r.m.s. 値とパッシブスカラー r.m.s 値の噴流広がり分布が非圧縮性噴流の実測結果と相似していることから、本 DNS 法によって計算された圧縮性乱流噴流の自己相似性が確認できた。マッハ数の増加による r.m.s. 値の減少が見られた。流体圧縮性に関連した流体変形と流体圧縮性に関係ない流体変形によるスカラー (パッシブスカラーと温度) 散逸率の生成項の PDF 分布について、流体の圧縮性に関係ない流体変形分の PDF 形状が正に偏ることがわかった。また、流体圧縮性に関連した流体変形分について、散逸率の生成項が 0 以外の PDF の大きさがマッハ数の増加とともに増加していくが、流体圧縮性に関係ない流体変形分の PDF の大きさと比べると桁違いほどの差があっ

た. このことから, 非圧縮性流体変形のうち compressive strain の方がスカラー散逸率の生成を促進する支配的な要因だとわかった. また, パッシブスカラーと温度散逸率の生成項の PDF 分布に強い相似性が見られた. 本章で示された結果が既往研究例の少ない圧縮性による乱流中の物質混合過程の影響を十分に解明し, 微視的な分子拡散過程と熱拡散過程を同じ散逸の時間スケールでモデリングする可能性を量的解析を通してはじめて証明した.

第三章では, マッハ数 0.6 の亜音速噴流とマッハ数 2.6 の超音速噴流に対する数値計算を陰的 LES 法で行った. そのデータによる統計的な解析結果と前章の DNS 結果と比較することで, 噴流ポテンシャルコア領域から自己相似領域までのパッシブスカラー場の時間発展過程, 自己相似領域における平均パッシブスカラーとその時間変化を支配するパッシブスカラーフラックス, 自己相似領域におけるパッシブスカラー変動の r.m.s. 値, 自己相似領域の噴流中心とせん断層付近における瞬間パッシブスカラーの確率密度関数と自己相似領域におけるパッシブスカラーバリエーションの平均散逸率の数値予測に対する陰的 LES 法の有効性が確認できた. また, 陰的 LES 法は流体の圧縮性によるパッシブスカラー場の影響を正確に再現することができた. さらに, 全スケールのパッシブスカラーバリエーションと乱流エネルギーの散逸率を格子成分とサブ格子成分に分解してそれぞれ解析した. 格子成分の散逸率は DNS 法と同じ散逸項を差分スキームで計算され, サブ格子成分の散逸率は Selective フィルターと Shock capturing フィルターを組み合わせた陰的 SGS モデルの減衰関数で計算された. 陰的 LES 法による瞬間散逸率の PDF を DNS 法の結果と比較し, 小さい変動スケールに対する高散逸率は主に陰的 SGS モデルで支配され, 大きい変動スケールに対する中間程度の散逸率は主に差分スキームで支配されることがわかった. また, 本計算の陰的 SGS モデルはサブ格子スケールの乱流の高散逸効果を提供するだけでなく, 擬似衝撃波のような圧力波による非物理的な振動の除去にも機能する. 既往研究にされていない格子スケール成分のパッシブスカラー散逸効果とサブ格子スケール (SGS) 成分のパッシブスカラー散逸効果をそれぞれ分けて定量化し, 格子幅により両成分の寄与度に変化しても全体の散逸率が正確に予測できたので, 本章の計算結果から格子数依存性の弱い陰的 LES スキームを確立し, これから化学反応を伴う圧縮性乱流用の LES-粒子法の確立には計算簡便性の高い格子計算手法として貢献した.

第四章では, 非圧縮性流れの分子拡散項に対して考案された混合体積モデル (MVM) を圧縮性乱流中の分子拡散項へと拡張し, 噴流マッハ数 0.6, 1.6, 2.6 の時間発展型二次元噴流の DNS データベースを用いたアプリオリ検証を行った. 混合体積モデルを用いることでパッシブスカラーの分子拡散項を精度よく予測できることがわかった. 過去の非圧縮性流れ用の混合体積モデルの検証結果^[12]と同様に, 分子拡散項において混合体積内の粒子密度の増加とともに混合体積モデルの予測精度が改善された. 特に, 乱流遷移領域における高精度な分子拡散の平均解析に必要な粒子密度の設定許容範囲が自己相似領域よりもっ

と厳しくなることが示された。本章では混合体積モデルが圧縮性移流拡散方程式における分子拡散項に対する計算妥当性を始めて検証できた。混合体積モデルを組み込んだ LES-粒子法を圧縮性流体の数値計算に拡張する可能性が示唆された。

以上の結論を以って、本研究で構築された陰的 LES スキームと混合体積モデルを利用した LES-粒子法が圧縮性を考慮した反応流が効率的に精度よく予測できることが期待される。これからの LES-粒子法でパッシブスカラーの移流拡散をラグランジュ的に解く際に、陰的 LES 法で計算された流れ場データでラグランジュ粒子の位置を計算し、パッシブスカラー場データで混合体積モデルにおける混合時間スケールを予測することで、物質混合を伴う圧縮性流れに対する LES-粒子法が確立できると期待される。

謝辞

本研究の進行と本論文の作成にあたり，終始適切な助言を賜り，また丁寧に指導して下さいました名古屋大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻の長田孝二教授，渡邊智昭助教に謹んで感謝の意を表します．2年間に経済的に支援して下さいましたLGSプログラムと1年間に経済的に支援して下さいました横山国際奨学財団に感謝いたします．

また多くの協力や助言を頂きました流体力学講座の皆様はこの場を借りてお礼申し上げます．なお，本研究は名古屋大学HPC計算科学連携研究プロジェクトの支援を受けて実施された．

(中国語) 在此特別感謝長田孝二教授和渡邊智昭助教五年来对我的研究上的幫助，以及父母和LGS項目和横山国際奨学財団給我的經濟上的援助．

研究業績

学会誌等

- (1)Y. Tai, T. Watanabe, K. Nagata, "Modelling of molecular diffusion and thermal conduction with multi-particle interaction in compressible turbulence", *Phys. Fluids*, Vol. 30, No. 3, 035108(14 PAGES), (2018), DOI: 10.1063/1.5018248.
- (2)Y. Tai, T. Watanabe, K. Nagata, "Implicit large eddy simulation of passive scalar transfer incompressible planar jet", *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, DOI: 10.1002/fld.4924. (出版準備中)
- (3)Y. Tai, T. Watanabe, K. Nagata, "Hybrid LES/Lagrangian particle simulation of passive scalar mixing in compressible turbulent jets ", *Comput. Fluids*. (審査中)

国際会議

- (1)Y. Tai, T. Watanabe, K. Nagata, "Mixing Volume Model for Molecular Diffusion and Thermal Conduction in Compressible Turbulence", ICCFD10, Barcelona, Spain, July2018.
- (2)Y. Tai, T. Watanabe, K. Nagata, "Implicit Large Eddy Simulations of Supersonic and Subsonic Planar Jets with Explicit Filtering Scheme", ASCHT2019, Tokyo, Japan, September2019.
- (3)Y. Tai, T. Watanabe, K. Nagata, "Hybrid Large Eddy Simulation and Lagrangian Particle Simulation of passive scalar mixing in a supersonic jet", DFD2019, Seattle, USA, November2019.

参考文献

- [1] O. Laget, A. Kleemann, S. Jay, B. Reveille, and S. Henriot. Gasoline engine development using CFD. *SAE Tec. Pap.*, p. 11, 2005.
- [2] C. Fureby, M. Chapuis, E. Fedina, and S. Karl. CFD analysis of the Hyshot II scramjet combustor. *P. Combust. Inst.*, Vol. 33, No. 2, pp. 2399–2405, 2011.
- [3] O. R. Kummitha, K. M. Pandey, and R. Gupta. CFD analysis of a scramjet combustor with cavity based flame holders. *Acta Astronaut.*, Vol. 144, pp. 244–253, 2018.
- [4] R. Draxler, D. Arnold, M. Chino, S. Galmarini, M. Hort, A. Jones, S. Leadbetter, A. Malo, C. Maurer, G. Rolph, et al. World Meteorological Organization’s model simulations of the radionuclide dispersion and deposition from the Fukushima Daiichi nuclear power plant accident. *J. Environ. Radioact.*, Vol. 139, pp. 172–184, 2015.
- [5] C. Bonadonna, A. Folch, S. Loughlin, and H. Puempel. Future developments in modelling and monitoring of volcanic ash clouds: outcomes from the first IAVCEI-WMO workshop on Ash Dispersal Forecast and Civil Aviation. *Bull. Volcanol.*, Vol. 74, No. 1, pp. 1–10, 2012.
- [6] S. Pope. Computations of turbulent combustion: progress and challenges. In *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 23, pp. 591–612. Elsevier, 1991.
- [7] W. Han, V. Raman, and Z. Chen. LES/PDF modeling of autoignition in a lifted turbulent flame: Analysis of flame sensitivity to differential diffusion and scalar mixing time-scale. *Combust. Flame*, Vol. 171, pp. 69–86, 2016.
- [8] D. H. Rowinski and S. B. Pope. Computational study of lean premixed turbulent flames using RANSPDF and LESPDF methods. *Combust. Theory Model.*, Vol. 17, No. 4, pp. 610–656, 2013.
- [9] P. Zhang, A. R. Masri, and H. Wang. Studies of the flow and turbulence fields in a turbulent pulsed jet flame using LES/PDF. *Combust. Theory Model.*, Vol. 21, No. 5, pp. 897–924, 2017.

- [10] T. Watanabe, Y. Sakai, K. Nagata, Y. Ito, and T. Hayase. LES–Lagrangian particle method for turbulent reactive flows based on the approximate deconvolution model and mixing model. *J. Comput. Phys.*, Vol. 294, pp. 127–148, 2015.
- [11] T. Watanabe and K. Nagata. LES–Lagrangian-particles-simulation of turbulent reactive flows at high Sc number using approximate deconvolution model. *AIChE Journal*, Vol. 62, No. 8, pp. 2912–2922, 2016.
- [12] T. Watanabe and K. Nagata. Mixing model with multi-particle interactions for lagrangian simulations of turbulent mixing. *Phys. Fluids*, Vol. 28, No. 8, p. 085103, 2016.
- [13] H. Hattori, T. Umehara, and Y. Nagano. Comparative study of DNS, LES and hybrid LES/RANS of turbulent boundary layer with heat transfer over 2d hill. *Flow Turbul. Combust.*, Vol. 90, No. 3, pp. 491–510, 2013.
- [14] C. Fureby, G. Tabor, H. Weller, and A. Gosman. A comparative study of subgrid scale models in homogeneous isotropic turbulence. *Phys. Fluids*, Vol. 9, No. 5, pp. 1416–1429, 1997.
- [15] S. Gorji, M. Seddighi, C. Ariyaratne, A. Vardy, TO’ Donoghue, D. Pokrajac, S. He. A comparative study of turbulence models in a transient channel flow. *Comput. Fluids*, Vol. 89, pp. 111–123, 2014.
- [16] S. Stanley, S. Sarkar, and J. P. Mellado González. A study of the flow-field evolution and mixing in a planar turbulent jet using direct numerical simulation. *J. Fluid Mech.*, Vol. 450, pp. 377–407, 2002.
- [17] N. Wu, Y. Sakai, K. Nagata, H. Suzuki, O. Terashima, and T. Hayase. Analysis of flow characteristics of turbulent plane jets based on velocity and scalar fields using DNS. *J. Fluid Sci. Technol.*, Vol. 8, No. 3, pp. 247–261, 2013.
- [18] Z. Bouali, B. Duret, F.-X. Demoulin, and A. Mura. DNS analysis of small-scale turbulence-scalar interactions in evaporating two-phase flows. *Int. J. Multiph. Flow*, Vol. 85, pp. 326–335, 2016.
- [19] Q. Ni. Compressible turbulent mixing: Effects of compressibility. *Phys. Rev. E*, Vol. 93, No. 4, p. 043116, 2016.
- [20] M. Danish, S. Suman, and S. S. Girimaji. Influence of flow topology and dilatation on scalar mixing in compressible turbulence. *J. Fluid Mech.*, Vol. 793, pp. 633–655, 2016.

- [21] X. Zhang, T. Watanabe, and K. Nagata. Passive scalar mixing near turbulent/non-turbulent interface in compressible turbulent boundary layers. *Phys. Scr.*, Vol. 94, No. 4, p. 044002, 2019.
- [22] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, Vol. 91, No. 3, pp. 99–164, 1963.
- [23] B. Wegner, Y. Huai, and A. Sadiki. Comparative study of turbulent mixing in jet in cross-flow configurations using LES. *Int. J. Heat Fluid Fl.*, Vol. 25, No. 5, pp. 767–775, 2004.
- [24] C. Le Ribault. Large eddy simulation of passive scalar in compressible mixing layers. *Int. J. Heat Mass Transf.*, Vol. 51, No. 13-14, pp. 3514–3524, 2008.
- [25] A. Uzun, G. A. Blaisdell, and A. S. Lyrintzis. Impact of subgrid-scale models on jet turbulence and noise. *AIAA Journal*, Vol. 44, No. 6, pp. 1365–1368, 2006.
- [26] T. Watanabe, Y. Sakai, K. Nagata, Y. Ito, and T. Hayase. Implicit large eddy simulation of a scalar mixing layer in fractal grid turbulence. *Phys. Scr.*, Vol. 91, No. 7, p. 074007, 2016.
- [27] T. Watanabe, Y. Sakai, K. Nagata, and Y. Ito. Large eddy simulation study of turbulent kinetic energy and scalar variance budgets and turbulent/non-turbulent interface in planar jets. *Fluid Dyn. Res.*, Vol. 48, No. 2, p. 021407, 2016.
- [28] C. Bogey and C. Bailly. Computation of a high reynolds number jet and its radiated noise using large eddy simulation based on explicit filtering. *Comput. Fluids*, Vol. 35, No. 10, pp. 1344–1358, 2006.
- [29] C. Shu, Wang. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. In *Advanced numerical approximation of non-linear hyperbolic equations*, pp. 325–432. Springer, 1998.
- [30] S. Pirozzoli. CAA for flow/acoustic interaction and high speed flows with shocks. *VKI Lecture Series*, Vol. 2006, , 2005.
- [31] N. De Cacqueray, C. Bogey, and C. Bailly. Investigation of a high-mach-number overexpanded jet using large-eddy simulation. *AIAA Journal*, Vol. 49, No. 10, pp. 2171–2182, 2011.

- [32] N. de Cacqueray and C. Bogey. Noise of an overexpanded mach 3.3 jet: non-linear propagation effects and correlations with flow. *Int. J. Aeroacoust.*, Vol. 13, No. 7-8, pp. 607–632, 2014.
- [33] C. Bogey and R. Gojon. Feedback loop and upwind-propagating waves in ideally expanded supersonic impinging round jets. *J. Fluid Mech.*, Vol. 823, pp. 562–591, 2017.
- [34] R. L. Curl. Dispersed phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors. *AIChE journal*, Vol. 9, No. 2, pp. 175–181, 1963.
- [35] C. Dopazo. Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet. Centerline evolution. *Phys. Fluids*, Vol. 18, No. 4, pp. 397–404, 1975.
- [36] C. Dopazo. Relaxation of initial probability density functions in the turbulent convection of scalar fields. *Phys. Fluids*, Vol. 22, No. 1, pp. 20–30, 1979.
- [37] S. Subramaniam and S. Pope. A mixing model for turbulent reactive flows based on Euclidean minimum spanning trees. *Combust. Flame*, Vol. 115, No. 4, pp. 487–514, 1998.
- [38] S. B. Pope. A model for turbulent mixing based on shadow-position conditioning. *Phys. Fluids*, Vol. 25, No. 11, p. 110803, 2013.
- [39] A. Y. Klimenko and S. Pope. The modeling of turbulent reactive flows based on multiple mapping conditioning. *Phys. Fluids*, Vol. 15, No. 7, pp. 1907–1925, 2003.
- [40] C. B. da Silva and J. C. Pereira. Invariants of the velocity-gradient, rate-of-strain, and rate-of-rotation tensors across the turbulent/nonturbulent interface in jets. *Phys. Fluids*, Vol. 20, No. 5, p. 055101, 2008.
- [41] M. M. Rogers and R. D. Moser. Direct simulation of a self-similar turbulent mixing layer. *Phys. Fluids*, Vol. 6, No. 2, pp. 903–923, 1994.
- [42] J. A. Redford, I. P. Castro, and G. N. Coleman. On the universality of turbulent axisymmetric wakes. *J. Fluid Mech.*, Vol. 710, pp. 419–452, 2012.
- [43] D. Li, J. Fan, and K. Cen. Direct numerical simulation of the entrainment coefficient and turbulence properties for compressible spatially evolving axisymmetric jets. *Fuel*, Vol. 102, pp. 470–477, 2012.
- [44] A. Kempf, M. Klein, and J. Janicka. Efficient generation of initial-and inflow-conditions for transient turbulent flows in arbitrary geometries. *Flow Turbul. Combust.*, Vol. 74, No. 1, pp. 67–84, 2005.

- [45] T. Watanabe, Y. Sakai, K. Nagata, and O. Terashima. Experimental study on the reaction rate of a second-order chemical reaction in a planar liquid jet. *AIChE J.*, Vol. 60, No. 11, pp. 3969–3988, 2014.
- [46] L. J. S. Bradbury. The structure of a self-preserving turbulent plane jet. *J. Fluid Mech.*, Vol. 23, pp. 31–64, 1965.
- [47] E. Gutmark and I. Wygnanski. The planar turbulent jet. *J. Fluid Mech.*, Vol. 73, No. 03, pp. 465–495, 1976.
- [48] B. R. Ramaprian and M. S. Chandrasekhara. LDA measurements in plane turbulent jets. *Trans. ASME: J. Fluids Engng.*, Vol. 107, No. 2, pp. 264–271, 1985.
- [49] G. Lodato, P. Domingo, and L. Vervisch. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 227, No. 10, pp. 5105–5143, 2008.
- [50] Z. Wang, P. He, Y. Lv, J. Zhou, J. Fan, and K. Cen. Direct numerical simulation of subsonic round turbulent jet. *Flow Turbul. Combust.*, Vol. 84, No. 4, pp. 669–686, 2010.
- [51] C. A. Kennedy and M. H. Carpenter. Several new numerical methods for compressible shear-layer simulations. *Appl. Numer. Math.*, Vol. 14, No. 4, pp. 397–433, 1994.
- [52] M. H. Carpenter and C. A. Kennedy. Fourth-order 2N-storage Runge-Kutta schemes. *NASA Tech. Memo.*, Vol. 109112, pp. 1–26, 1994.
- [53] C. A. Kennedy and A. Gruber. Reduced aliasing formulations of the convective terms within the Navier–Stokes equations for a compressible fluid. *J. Comput. Phys.*, Vol. 227, No. 3, pp. 1676–1700, 2008.
- [54] A. Abdel-Rahman. A review of effects of initial and boundary conditions on turbulent jets. *WSEAS Trans. Fluid Mech.*, Vol. 4, No. 5, pp. 257–275, 2010.
- [55] R. C. Deo, G. J. Nathan, and J. Mi. Similarity analysis of the momentum field of a subsonic, plane air jet with varying jet-exit and local Reynolds numbers. *Phys. Fluids*, Vol. 25, No. 1, p. 015115, 2013.
- [56] J. E. F. Williams, J. Simson, and V. J. Virchis. ‘Crackle’: an annoying component of jet noise. *J. Fluid Mech.*, Vol. 71, No. 2, pp. 251–271, 1975.

- [57] J. Westerweel, C. Fukushima, J. M. Pedersen, and J. Hunt. Momentum and scalar transport at the turbulent/non-turbulent interface of a jet. *J. Fluid Mech.*, Vol. 631, pp. 199–230, 2009.
- [58] C. Lubbers, G. Brethouwer, and B. Boersma. Simulation of the mixing of a passive scalar in a round turbulent jet. *Fluid Dyn. Res.*, Vol. 28, No. 3, p. 189, 2001.
- [59] L. Chua and R. Antonia. Turbulent Prandtl number in a circular jet. *Intl J. Heat Mass Transfer*, Vol. 33, No. 2, pp. 331–339, 1990.
- [60] J. B. Freund, S. K. Lele, and P. Moin. Compressibility effects in a turbulent annular mixing layer. Part 1. Turbulence and growth rate. *J. Fluid Mech.*, Vol. 421, pp. 229–267, 2000.
- [61] G. Brethouwer, J. C. R. Hunt, and F. Nieuwstadt. Micro-structure and Lagrangian statistics of the scalar field with a mean gradient in isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, Vol. 474, pp. 193–225, 2003.
- [62] G. Gulitski, M. Kholmyansky, W. Kinzelbach, B. Lüthi, A. Tsinober, and S. Yorish. Velocity and temperature derivatives in high-Reynolds-number turbulent flows in the atmospheric surface layer. Part 3. Temperature and joint statistics of temperature and velocity derivatives. *J. Fluid Mech.*, Vol. 589, pp. 103–123, 2007.
- [63] W. T. Ashurst, A. Kerstein, R. Kerr, and C. Gibson. Alignment of vorticity and scalar gradient with strain rate in simulated Navier–Stokes turbulence. *Phys. Fluids*, Vol. 30, No. 8, pp. 2343–2353, 1987.
- [64] C. Bogey and C. Bailly. A family of low dispersive and low dissipative explicit schemes for flow and noise computations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 194, No. 1, pp. 194–214, 2004.
- [65] O. V. Vasilyev, T. S. Lund, and P. Moin. A general class of commutative filters for LES in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, Vol. 146, No. 1, pp. 82–104, 1998.
- [66] C. Bogey, N. De Cacqueray, and C. Bailly. A shock-capturing methodology based on adaptive spatial filtering for high-order non-linear computations. *J. Comput. Phys.*, Vol. 228, No. 5, pp. 1447–1465, 2009.
- [67] N. T. Clemens and M. Mungal. Large-scale structure and entrainment in the supersonic mixing layer. *J. Fluid Mech.*, Vol. 284, pp. 171–216, 1995.

-
- [68] C. Bogey and C. Bailly. Turbulence and energy budget in a self-preserving round jet: direct evaluation using Large Eddy simulation. *J. Fluid Mech.*, Vol. 627, pp. 129–160, 2009.
- [69] B. J. Geurts and J. Fröhlich. A framework for predicting accuracy limitations in large-eddy simulation. *Phys. Fluids*, Vol. 14, No. 6, pp. L41–L44, 2002.
- [70] C. Dopazo and E. E. O’Brien. An approach to the autoignition of a turbulent mixture. *Acta Astronaut.*, Vol. 1, No. 9-10, pp. 1239–1266, 1974.
- [71] T. Watanabe, Y. Sakai, K. Nagata, Y. Ito, and T. Hayase. Reactive scalar field near the turbulent/non-turbulent interface in a planar jet with a second-order chemical reaction. *Phys. Fluids*, Vol. 26, No. 10, p. 105111, 2014.
- [72] T. Watanabe, T. Naito, Y. Sakai, K. Nagata, and Y. Ito. Mixing and chemical reaction at high Schmidt number near turbulent/nonturbulent interface in planar liquid jet. *Phys. Fluids*, Vol. 27, No. 3, p. 035114, 2015.
- [73] M. Gampert, V. Narayanaswamy, P. Schaefer, and N. Peters. Conditional statistics of the turbulent/non-turbulent interface in a jet flow. *J. Fluid Mech.*, Vol. 731, pp. 615–638, 2013.